



# Déconvolution impulsionnelle multi-source. Application aux signaux électro- myographiques

G. Di

## ► To cite this version:

G. Di. Déconvolution impulsionnelle multi-source. Application aux signaux électro- myographiques. Traitement du signal et de l'image [eess.SP]. Ecole Centrale de Nantes (ECN), 2009. Français. NNT : . tel-00521755

**HAL Id: tel-00521755**

**<https://theses.hal.science/tel-00521755>**

Submitted on 28 Sep 2010

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ÉCOLE CENTRALE DE NANTES

ÉCOLE DOCTORALE

STIM

Année: 2009

N° B.U.:

# THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité:

Automatique, Robotique, Traitement du signal et Informatique Appliquée

Présentée et soutenue publiquement par:

DI GE

le 4 décembre 2009  
à l'école centrale de Nantes, Nantes

TITRE

## DÉCONVOLUTION IMPULSIONNELLE MULTI-SOURCE. APPLICATION AUX SIGNAUX ÉLECTROMYOGRAPHIQUES

Jury

Président :	FABRICE WENDLING	DR INSERM, Université de Rennes 1
Rapporteur :	JEAN-YVES TOURNERET	Professeur, Université de Toulouse
	DAVID BRIE	Professeur, Université Henri Poincaré, Nancy
Examineur :	JÉRÔME IDIER	DR CNRS, ECN
	ERIC LE CARPENTIER	Maître de Conférences, ECN
	DARIO FARINA	Professeur, Université d'Aalborg

---

Directeur de thèse: Jérôme Idier  
Laboratoire: IRCCyN  
Co-encadrant: Eric Le Carpentier  
Laboratoire: IRCCyN

N° ED : 503-070



*A toutes les personnes qui ont contribué à l'accomplissement de cette thèse ...*



# REMERCIEMENTS

**J**E tiens à remercier en tout premier lieu Jérôme Idier qui a dirigé cette thèse. Tout au long de ces trois années, il a su orienter mes recherches aux bons moments en me faisant découvrir l'art du traitement de signal au travers de son regard d'expert. Il a toujours été disponible pour d'intenses et rationnelles discussions.

Je tiens à remercier Eric Le Carpentier qui m'a accepté en tant que candidat de doctorant, accueilli au laboratoire de l'IRCCyN et co-encadré durant les trois années de thèse. Pour tout cela, sa confiance et son soutien financier en fin de thèse, je le remercie vivement.

Je ne sais comment exprimer ma gratitude à ces deux personnes autrement qu'en leur promettant d'agir comme eux avec des étudiants dans ma situation, si un jour l'occasion m'en est donnée.

Je remercie très sincèrement les rapporteurs de cette thèse Jean-Yves Tourneret et David Brie pour la rapidité avec laquelle ils ont lu mon manuscrit et l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Merci également aux autres membres du jury qui ont accepté de juger ce travail : Fabrice Wendling et Dario Farina. Grâce à ce dernier, j'ai eu également le plaisir de collaborer avec le laboratoire SMI, du département HST de l'université d'Aalborg au Danemark.

Mes reconnaissances vont également à l'ensemble du personnel de l'équipe ADTSI : à Marie-Françoise Lucas pour son amitié et ses encouragements, à Saïd Moussaoui pour ses conseils et sa gentillesse, à Jean-Marie Piasco pour ses encouragements et sa bonne humeur.

Je remercie Michel Malabre, directeur du laboratoire IRCCyN, ainsi que Jean-François Lafay, ex-directeur pour m'avoir accueilli au sein de l'institution, et pour les conseils stimulants que j'ai eu l'honneur de recevoir de leur part.

Je n'oublierai pas les aides permanentes reçues du personnel administratif du laboratoire : Emily Thureau, Michèle-Anne Audrain, Armelle Radigois, Patricia Briere.

Enfin, une pensée émue pour tous les étudiants et les jeunes enseignant-chercheurs avec qui j'ai partagé une pause, un café ou un repas pendant ces trois années : Thomas Veit, Alexis Girin, Paul-André Barrière, Louis-Marie Traonouez, Pedro Neiva Kvieska, Didier Lime, Morgane Magnin, Emilie Chouzenoux, Jonathan Fromenthin, Rola Kassem, Charlotte Seidner, ... et toute la troupe du très convivial laboratoire IRCCyN.

Je conclurai en remerciant de tout cœur l'être aimé, mon épouse Lu, qui m'a tant apporté durant la thèse. Aucun mot ne peut exprimer ma reconnaissance pour sa présence à mes côtés, pour les sacrifices qu'elle a faits et pour son courage de me supporter tous les jours.

Nantes, le 11 décembre 2009.



# TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	ix
LISTE DES FIGURES	x
INTRODUCTION	1
1 MODÉLISATION DES SIGNAUX EMG INTRAMUSCULAIRES	3
1.1 POSITION DU PROBLÈME . . . . .	3
1.2 BRÈVE TAXINOMIE DE LA DÉCOMPOSITION DES SIGNAUX EMG . . . . .	5
1.3 MODÈLE BAYÉSIEN HIÉRARCHIQUE . . . . .	6
1.3.1 La vraisemblance . . . . .	6
1.3.2 Les lois <i>a priori</i> . . . . .	7
1.3.3 La distribution <i>a posteriori</i> jointe . . . . .	9
2 PRÉTRAITEMENT ET OPTIMISATION PAR LA RECHERCHE TABOU	11
2.1 PRÉTRAITEMENT DES DONNÉES . . . . .	11
2.2 MÉTHODE PAR MAXIMISATION ITÉRATIVE . . . . .	17
2.2.1 Loi conditionnelle de $(\mathbf{h}   \Theta \setminus \mathbf{h}, \mathbf{z})$ . . . . .	20
2.2.2 Loi conditionnelle de $(m_i   \Theta \setminus m_i, \mathbf{z})$ . . . . .	21
2.2.3 Loi conditionnelle de $(\sigma_i^2   \Theta \setminus \sigma_i^2, \mathbf{z})$ . . . . .	21
2.2.4 Loi conditionnelle de $(\sigma_e^2   \Theta \setminus \sigma_e^2, \mathbf{z})$ . . . . .	21
2.2.5 Maximisation par rapport à $(x_i^{(k)})_i$ . . . . .	22
2.2.6 Maximisation conjointe de $(x_i)_i$ dans deux segments . . . . .	24
2.3 VALIDATION . . . . .	25
2.3.1 Simulation . . . . .	26
2.3.2 Signaux réels . . . . .	26
2.3.3 Critère de comparaison . . . . .	26
2.3.4 Tests en simulation . . . . .	27
2.3.5 Tests sur les signaux EMG réels . . . . .	29
2.4 CONCLUSION . . . . .	33
3 DÉCONVOLUTION D'UN PROCESSUS IMPULSIONNEL	35
3.1 INTRODUCTION . . . . .	35
3.2 FORMULATION DU PROBLÈME . . . . .	36
3.3 ÉCHANTILLONNEUR DE GIBBS . . . . .	38
3.4 RÉÉCHANTILLONNAGE DU DÉCALAGE TEMPOREL . . . . .	39
3.5 RÉÉCHANTILLONNAGE DE L'ÉCHELLE . . . . .	40
3.5.1 Interprétation par algorithme de Gibbs généralisé . . . . .	42
3.5.2 Rééchantillonnage de l'échelle plus complet . . . . .	43



3.6	ÉCHANTILLONNAGE INEFFICACE SUR $(q, x)$	45
3.7	ÉCHANTILLONNEUR $K$ -TUPLET	46
3.7.1	Motivation	46
3.7.2	Réalisation numérique	48
3.8	ÉCHANTILLONNEUR PARTIELLEMENT MARGINALISÉ	50
3.8.1	Marginalisation partielle de $x$	50
3.8.2	Échantillonnage des variables de Bernoulli	53
3.8.3	Décomposition de Cholesky	55
3.9	TEST EN SIMULATION	56
3.9.1	Diagnostic de convergence	56
3.9.2	Tests	57
3.10	CONCLUSION	59
4	DÉCOMPOSITION PAR MCMC	61
4.1	MODÈLE D'AMPLITUDE VARIABLE	61
4.2	MÉTHODE DE DÉCOMPOSITION PAR MCMC	63
4.2.1	Échantillonnage de $(x_i)_i^{(k)}$	63
4.2.2	Échantillonnage de $(s_i)_i$	68
4.2.3	Rééchantillonnage d'échelle	69
4.3	IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE	71
4.4	TESTS ET VALIDATION	71
4.4.1	Problème de positivité des amplitudes	71
4.4.2	Résultats de la décomposition par MCMC	73
4.4.3	Distribution marginale des amplitudes	75
4.5	CONCLUSION	76
5	CONCLUSION	77
A	ANNEXES	79
A.1	MÉTHODES DE MONTE CARLO PAR CHÂÎNES DE MARKOV	80
A.1.1	Principe de Monte Carlo	80
A.1.2	Propriétés des chaînes de Markov	80
A.1.3	Algorithmes de MCMC	82
A.2	ALGORITHME DE LA CLASSIFICATION BAYÉSIENNE NON-PARAMÉTRIQUE	84
A.3	LOIS CONDITIONNELLES DU MODÈLE BG	87
A.4	GROUPE LOCALEMENT COMPACT ET MESURE DE HAAR	88
A.5	LEMME D'INVERSION MATRICIELLE	89
A.6	MISE-À-JOUR DE FACTEUR DE CHOLESKY (SUPPRESSION D'UN PIC)	89
A.7	LA MÉTHODE DE REJET	91
A.7.1	la méthode de ratio	92
A.7.2	Application à la simulation de la loi GIG	92
A.7.3	Application à la simulation d'échantillonnage d'échelle	93
	BIBLIOGRAPHIE	95
	NOTATIONS	101

# Liste des tableaux

2.1	Statistiques des durées des segments . . . . .	14
2.2	Algorithme Tabou . . . . .	22
2.3	Résultats de la décomposition des signaux EMG simulés (10 s) . . . . .	28
2.4	Comparaison des deux versions de maximisation . . . . .	31
2.5	Résultats par maximisation conjointe . . . . .	31
3.1	Algorithme de Cheng et al. [1996] . . . . .	38
3.2	Étape de Metropolis-Hastings par Labat et Idier [2006] . . . . .	40
3.3	Algorithme du rééchantillonnage d'échelle. . . . .	42
3.4	Une étape de l'algorithme de Gibbs généralisé [Liu et Wu 1999] . . . . .	43
3.5	Algorithme de rééchantillonnage d'échelle proposé . . . . .	45
3.6	Échantillonneur de Gibbs par $K$ -tuplet . . . . .	48
3.7	Nombres d'itérations nécessaires avant la première visite . . . . .	48
3.8	Étape 1(a),(b) de l'échantillonneur $K$ -tuplet . . . . .	50
3.9	Comparaison de convergence dans la famille $K$ -tuplet . . . . .	50
3.10	Échantillonneur partiellement marginalisé . . . . .	52
3.11	Échantillonneur partiellement marginalisé (bis) . . . . .	52
3.12	Échantillonneur de Gibbs partiellement marginalisé . . . . .	56
4.1	Algorithme de décomposition par MCMC . . . . .	63
4.2	L'étape M-H pour les trains d'impulsions . . . . .	66
4.3	Implémentation MCMC pour la décomposition de EMG . . . . .	72
4.4	Évolution du nombre d'impulsions aberrantes . . . . .	74
4.5	Hyperparamètres constants du modèle . . . . .	74
4.6	Résultats de décomposition par MCMC des EMG . . . . .	74
4.7	MCMC (modèle d'amplitudes uniformes) . . . . .	75
4.8	Comparaison des variances de bruits . . . . .	75
A.1	Algorithme de Metropolis-Hastings . . . . .	83
A.2	Algorithme de Metropolis-Hastings indépendant . . . . .	84
A.3	Algorithme de la méthode de rejet . . . . .	92
A.4	Algorithme de la méthode de ratio . . . . .	92

# LISTE DES FIGURES

1.1	Schéma de l'unité motrice et électromyographe . . . . .	4
1.2	Exemple de décomposition . . . . .	4
1.3	Modèle EMG mono-capteur . . . . .	7
1.4	Histogramme d'ISI . . . . .	8
1.5	DAG du modèle bayésien hiérarchique . . . . .	10
2.1	Organigramme du programme décomposition. . . . .	12
2.2	Comparaison du signal EMG brut et filtré . . . . .	13
2.3	Détection des extrema des potentiels . . . . .	15
2.4	Histogramme des décalages temporels . . . . .	18
2.5	Comparaison des deux méthodes de classification . . . . .	19
2.6	Illustration des trois configurations du voisinage . . . . .	24
2.7	Exemple de décomposition du signal simulé . . . . .	28
2.8	Comparaison des deux versions de décomposition par recherche Tabou . . . . .	30
2.9	Superposition des 7 potentiels . . . . .	32
2.10	La fréquence instantanée . . . . .	32
3.1	Test de l'ambiguïté temporelle . . . . .	39
3.2	Séquence de BG par l'échantillonneur de référence . . . . .	46
3.3	Trois estimations obtenues par l'échantillonneur de référence . . . . .	47
3.4	Séquences BG obtenues par Gibbs partiellement marginalisé . . . . .	53
3.5	Evolution du critère MPSRF . . . . .	57
3.6	Estimation issue de l'échantillonneur partiellement marginalisé . . . . .	58
3.7	Comparaison du MPSRF . . . . .	59
3.8	Comparaison de l'évolution des coûts par itération . . . . .	59
3.9	Temps de convergence des 5 échantillonneurs . . . . .	60
4.1	DAG du nouveau modèle bayésien . . . . .	62
4.2	Illustration de la définition de voisinage . . . . .	67
4.3	Exemples des amplitudes négatives . . . . .	73
4.4	Histogramme des amplitudes . . . . .	75

# INTRODUCTION

## CONTEXTE ET PROBLÉMATIQUE DE LA THÈSE

Ce document rapporte le travail de thèse mené à l'Institut de Recherche en Communications et Cybernétique de Nantes (IRCCyN), dans l'équipe Analyse et Décision en Traitement du Signal et Image (ADTSI). Des méthodes stochastiques de traitement du signal sont présentées pour la résolution automatique d'un problème de décomposition, avec application aux signaux électromyographiques (EMG).

Un signal EMG est obtenu par mesure de l'activité électrique musculaire à l'aide d'une micro-électrode introduite dans le muscle ; les fibres musculaires sont regroupées en unités indépendantes, les unités motrices. Une décomposition d'un signal EMG consiste à détecter et identifier les potentiels d'action (onde caractéristique de chaque unité motrice). La décomposition permet l'analyse ultérieure des propriétés des unités motrices [Luca et al. 1982] et fournit une interprétation du rôle des neurones dans les muscles. Les outils actuels permettant d'extraire les informations d'un signal EMG consistent en une décomposition manuelle qui s'avère longue et fastidieuse. Afin d'automatiser la procédure, il est nécessaire de proposer de nouvelles méthodes d'analyse exploitant de manière efficace toutes les informations récoltées dans l'enregistrement du signal, de même que les contraintes physiologiques (les informations *a priori*) fournies par les experts.

De nombreux travaux examinent ce problème sous le nom de « classification des potentiels d'action » ou « spike sorting » [Schmidt 1984, Lewicki 1998]. Trois difficultés majeures sont généralement identifiées : (1) déterminer le nombre d'unités motrices ; (2) déterminer leur potentiel d'action ; (3) décomposer les superpositions de potentiels.

Le sujet de cette thèse consiste à étudier les algorithmes d'inférence bayésienne adaptés à la décomposition de signal EMG. Tout d'abord, un modèle paramétrique de représentation statistique du phénomène physique est proposé, et on en déduit la fonction de vraisemblance ; on probabilise les variables inconnues du modèle par des lois *a priori* conjuguées, en respectant certaines contraintes physiologiques. Ensuite, la décomposition est essentiellement un problème « combinatoire » vis-à-vis des instants d'impulsions et leur affectation à une unité.

La première solution fait appel à un algorithme d'optimisation déterministe du critère du maximum *a posteriori* (MAP), de façon cyclique par rapport à chaque paramètre, les autres étant fixés. La structure des lois *a priori* conjuguées permet de maximiser analytiquement par rapport aux paramètres continus ; par contre, la maximisation par rapport aux trains d'impulsions modélisés par des vecteurs binaires nous amène à un problème d'optimisation combinatoire N-P complet, dont la solution exacte n'est garantie qu'en explorant l'ensemble des solutions admissibles. Notons que plusieurs pistes sont proposées dans la littérature dans la famille « méta-heuristique » de la recherche opérationnelle, tels que l'algorithme génétique [Goldberg 1989], le recuit simulé [Kirkpatrick et al. 1983, Geman et Geman 1984], la recherche avec « Tabou » [Glover 1989], la méthode de GRASP [Feo et Resende 1995], etc. Dans

le présent manuscrit, seul l'algorithme déterministe par la recherche avec « Tabou » est implémenté en raison de sa simplicité.

La deuxième solution est basée sur la méthode de *Monte Carlo par Chaîne de Markov* (MCMC) [Gelman et al. 1995, chapitre 11]. L'échantillonnage des variables continues ne pose pas de difficulté grâce au choix des lois *a priori* conjuguées. Pour traiter le problème de l'échantillonnage des trains d'impulsions, on développe un algorithme de Gibbs hybride, dans lequel une étape de type « Metropolis-Hastings » garantit l'ergodicité de la chaîne de Markov sans explorer de façon exhaustive un espace combinatoire. Les variables discrètes sont ensuite estimées par vote majoritaire (MAP marginal) et les variables continues par moyennage (espérance *a posteriori* marginale). Il est à noter que la solution triviale consistant en un échantillonnage scalaire (instant par instant) des paramètres binaires (les trains d'impulsions) ne s'avère pas efficace. Il est montré dans le chapitre 3 que dans le cas de déconvolution Bernoulli-Gaussienne mono-source, les résultats s'améliorent lorsqu'on adopte une stratégie de balayage vectoriel en échantillonnant les paramètres binaires par bloc. Le réglage de la longueur des blocs réalise un compromis entre l'implémentabilité et l'efficacité de l'algorithme.

## ORGANISATION DU MANUSCRIT

1. Le premier chapitre de la thèse est consacré à la formulation du problème direct de la décomposition des signaux EMG. Modèle bayésien, « spike sorting ».
2. Le deuxième chapitre apporte une première solution par Recherche Tabou pour la modélisation d'un critère de MAP. Méthode, simulation, tests expérimentaux.
3. Le troisième chapitre étudie le problème voisin de déconvolution bernoulli-gaussien par MCMC. Pour aboutir à un algorithme efficace, on regroupe les astuces dans la littérature et certaines contributions de la thèse. Méthode, simulation.
4. Le quatrième chapitre concerne l'estimation par MCMC pour un modèle d'impulsions d'amplitude variable. Elle s'inspire de l'algorithme MCMC de déconvolution aveugle BG. Méthode, simulation, tests expérimentaux.
5. Conclusion et perspectives.

# MODÉLISATION DES SIGNAUX EMG INTRAMUSCULAIRES

1

## 1.1 POSITION DU PROBLÈME

L'électromyographie (EMG) est une technique d'enregistrement des signaux d'activation des muscles ; ces signaux sont constitués de potentiels électriques générés par les cellules musculaires lorsqu'elles sont en contraction ou au repos. L'élément déclencheur de la contraction est la transmission d'un « ordre » par une terminaison nerveuse juxtaposée à la fibre et reliée au cerveau. Les motoneurones- $\alpha$  innervent plusieurs fibres musculaires et permettent une contraction ou un relâchement synchrone. L'ensemble nerf-fibres musculaires est appelé « unité motrice », structure de base autour de laquelle s'articule la physiologie musculaire. Le motoneurone (neurone moteur) situé dans la moelle épinière se prolonge par l'axone qui chemine dans le nerf périphérique et se ramifie pour que chacune de ces ramifications n'innerve qu'une seule fibre musculaire (cf Fig. 1.1). Par exemple, au niveau du biceps brachial, un motoneurone innerve environ 100 fibres musculaires. Lors d'un mouvement, le contrôle de la force de contraction est lié au nombre d'unités motrices recrutées.

Le signal EMG est utile dans de nombreuses applications cliniques et biomédicales. Il est utilisé comme un outil de diagnostic pour identifier les maladies neuromusculaires, évaluer la lombalgie, la kinésiologie et des troubles du contrôle musculaire. Il est également exploité comme un signal de contrôle pour les prothèses, tels que les prothèses de mains, de bras, et des membres inférieurs.

Deux types d'enregistrement sont largement utilisés : il s'agit soit d'électrodes en forme d'aiguilles intramusculaires (EMG intramusculaire), soit d'électrodes que l'on applique à la surface de la peau (EMG de surface). On peut également trouver les versions mono et multi-capteur pour ces deux types d'acquisition selon le nombre d'électrodes appliquées lors de la mesure. Une observation de signal EMG résulte de la superposition d'ondes élémentaires (potentiels d'action), dont la forme et le taux d'apparition sont caractéristiques de chaque unité motrice. Le processus de « décomposition » consiste à séparer le signal EMG brut en trains constitutifs des potentiels d'action (voir figure 1.2 : exemple de la décomposition sur un segment de signal EMG, une superposition de potentiels d'action des 7 unités motrices actives), une étape essentielle en vue d'obtenir les paramètres suivants : le taux d'impulsions pour chaque unité motrice, la corrélation des taux entre les unités recrutées, la synchronisation des unités motrices, etc. Notre étude porte sur la décomposition des signaux EMG intramusculaires mono-capteur, qui malgré leur caractère invasif, sont moins sujets à la

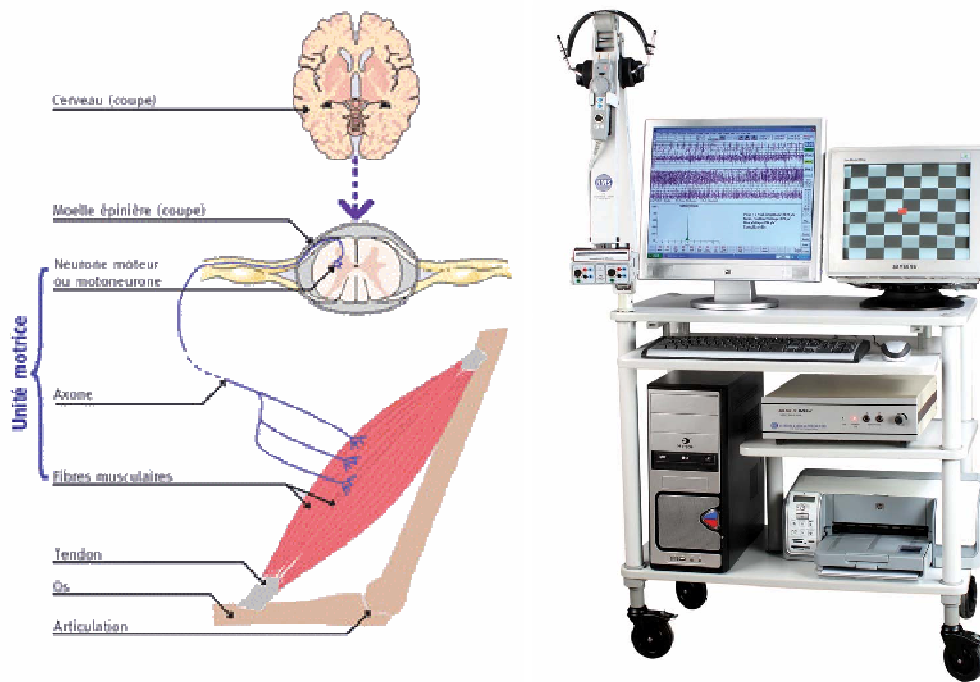


FIG. 1.1 – à gauche : schéma de l'unité motrice ; à droite : électromyographe

diaphonie et donc plus adaptés à une interprétation des comportements des cellules musculaires profondes [De Luca et Merletti 1988, Kleissen et al. 1998].

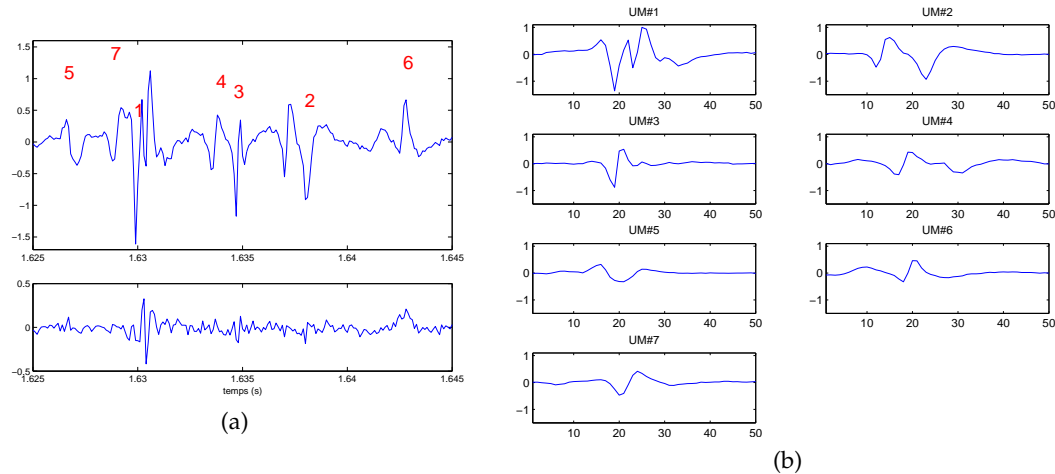


FIG. 1.2 – Exemple de décomposition du signal EMG intramusculaire mono-capteur. (a) En haut : un segment du signal EMG intramusculaire et les labels d'unités motrices obtenus par décomposition ; en bas : l'erreur résiduelle de reconstruction. (b) Les 7 potentiels d'action correspondants

Ce chapitre propose une modélisation bayésienne hiérarchique du signal EMG qui prend en compte non seulement la vraisemblance des données, mais aussi la régularité des trains d'impulsions, à travers les lois *a priori*. En effet, pour une unité motrice, l'apparition d'un potentiel est suivie d'une période, dite réfractaire, pendant laquelle il ne peut y avoir un nouveau potentiel Moritz et al. [2005]. L'utilisation de ces informations est mentionnée dans les perspectives de plusieurs publications dédiées à la décomposition des superpositions des potentiels d'action [Lefever et De Luca 1982, Lewicki 1998, McGill Jul 2002]. Actuellement, l'algorithme le plus utilisé (EMGLAB) [McGill Jul 2002, McGill et al. Dec 2005] permet à un expert humain d'agir interactivement pour garan-

tir une certaine régularité des trains d'impulsions. Fee *et al.* [Fee et al. 1996] sont, à notre connaissance, les seuls à intégrer la régularité des trains d'impulsions dans l'algorithme de classification. L'idée consiste à utiliser l'histogramme des intervalles entre impulsions pour tenter de fusionner deux classes. L'hypothèse de Fee et al. [1996] est que deux classes ne devraient pas être fusionnées si l'histogramme lié à une forme de potentiel fait apparaître un grand nombre d'impulsions dans la période réfractaire. Mais, dans cette approche, les potentiels superposés ne sont pas considérés comme tels, ce qui vient biaiser les résultats [Lewicki 1998]. Un autre inconvénient est que l'approche repose sur la construction d'histogrammes, ce qui nécessite une collecte des données de durée suffisamment longue.

La méthode que nous proposons dans cette thèse permet de gérer le problème de superposition par inférence bayésienne. La présence ou non d'une unité motrice et les instants d'impulsions sont probabilisés dans un cadre bayésien afin de décomposer et classer simultanément les potentiels superposés, et ce dans un contexte automatique.

Ce chapitre est organisé comme suit. Une brève introduction de l'état de l'art est d'abord donnée dans la section 1.2. Un modèle bayésien hiérarchique est ensuite proposé dans la section 1.3.

## 1.2 BRÈVE TAXINOMIE DE LA DÉCOMPOSITION DES SIGNAUX EMG

De nombreuses techniques de décomposition des signaux EMG intramusculaires (*spike sorting*) ont été proposées. Le terme décomposition englobe l'ensemble de la détection et la classification des potentiels d'action issus de multiples unités motrices. Une méthode peu coûteuse est le seuillage d'amplitude, qui ne peut ni classer les potentiels d'action, ni résoudre le problème de superposition. Cette technique, fondée sur l'estimation du niveau de bruit, représente souvent la phase de prétraitement des données dans les algorithmes plus complexes.

On distingue ensuite deux familles d'algorithmes pour les méthodes de classification sans traiter la superposition. D'une part, les outils qui extraient des descripteurs rudimentaires (tels que le nombre de passages par zéro, les amplitudes, la durée entre pics, etc) [Wheeler et Heetderks 1982, Schmidt 1984], pour alimenter une procédure de visualisation telle que l'analyse en composantes principales (PCA) puis une procédure de classification. Une technique de filtrage adapté permet de distinguer les potentiels les uns des autres. Cette technique est numériquement peu coûteuse [Roberts et Hartline 1975]. Il est montré [Wheeler et Heetderks 1982] que cette méthode peut aussi s'interpréter comme une classification par plus proches voisins au sens de la distance euclidienne.

Or, le grand défi de la décomposition reste essentiellement la séparation des potentiels qui se superposent d'une manière destructive [Lewicki 1994, McGill Jul 2002], par exemple dans le cas où le lobe positif d'un potentiel compense le lobe négatif d'un autre, auquel cas se dégrade la qualité de classification des méthodes citées ci-dessus. Il est donc nécessaire de traiter les cas d'apparition plus ou moins simultanée de potentiels issus de différentes unités motrices. Or, l'espace des solutions admissibles de superposition est combinatoire :  $2^{IL}$  configurations possibles pour un nombre d'unités motrices  $I$  et une longueur de signal  $L$ . Les méthodes actuelles résolvent le problème de la superposition en effectuant une recherche sur un espace réduit tel que dans [Lewicki 1994, Atiya 1992] afin d'alléger la complexité. [Atiya 1992] compare les données avec les reconstructions de toutes les combinaisons et alignements possibles de 2 potentiels d'action (l'espace restrictif de recherche). Cette approche permet d'identifier exactement les superpositions, mais a l'inconvénient d'être lourde en calcul, en particulier



pour une généralisation à un nombre plus élevé de potentiels d'action dans une superposition. La méthode de programmation dynamique [Lewicki 1994], qui utilise la technique d'exploration rapide d'un arbre k-d (*k-dimensional tree*), est également limitée par le stockage mémoire nécessaire pour créer une telle structure de données, et par conséquent limité à un maximum de 2 potentiels d'action superposés. Cette restriction n'est pas justifiée dès qu'il y a plus de deux unités motrices actives et que leur taux de mise à feu est fort. D'autres approches ne sont pas limitées dans le nombre d'impulsions simultanées, mais nécessitent généralement des interactions avec un opérateur. Par exemple dans l'esprit de l'algorithme de *greedy*, l'algorithme EMGLAB [McGill Jul 2002, McGill et al. Dec 2005] compare récursivement le signal avec les potentiels superposés et évalue les erreurs résiduelles de reconstruction. L'intervention d'un expert est nécessaire lorsque l'erreur de reconstruction ne parvient pas à atteindre un niveau seuil après un certain nombre d'essais McGill [Jul 2002]. Il incombe ensuite aux experts de limiter l'espace de recherche en éliminant certains unités motrices à partir des informations sur les impulsions voisines de la même unité.

## PRINCIPALES CONTRIBUTIONS

Cette thèse apporte les quatre contributions suivantes :

1. La proposition d'un modèle bayésien hiérarchique, qui permet d'intégrer les informations *a priori* sur la physiologie du signal, afin d'aboutir à des algorithmes d'inférence bayésienne entièrement automatiques.
2. La décomposition par optimisation du critère du maximum *a posteriori*, où l'on propose d'utiliser la métaheuristique de « recherche de Tabu ».
3. La décomposition par une méthode stochastique de type MCMC, certes plus lourde en calculs, mais nécessitant moins de réglages par l'opérateur.
4. La méthode ci-dessus fait appel à diverses techniques développées dans le contexte voisin de la déconvolution bernoulli-gaussienne, auquel ce travail apporte quelques améliorations en terme d'efficacité de l'échantillonneur.

### 1.3 MODÈLE BAYÉSIEN HIÉRARCHIQUE

#### 1.3.1 La vraisemblance

Un signal EMG mono-capteur  $z$  qui comprend les contributions de  $I$  unités motrices peut être modélisé par la somme bruitée de  $I$  composantes, chacune étant la réponse d'un système linéaire (dont la réponse impulsionnelle  $h_i$  correspond au potentiel d'action de chaque unité motrice) excité par un train d'impulsion  $s_i$  :

$$z = \sum_{i=1}^I h_i * s_i + \epsilon \quad (1.1)$$

Chaque train s'exprime par une fonction indicatrice, soit  $s_i = 1_{x_i}$  où le vecteur  $x_i$  contient les instants d'impulsions. On note  $n_i = \dim(x_i)$  le nombre d'impulsions dans le train  $s_i$  relevant de la  $i^{\text{ème}}$  unité motrice.  $x_{ij}$  indique donc l'instant de la  $j$ -ème impulsion pour la  $i$ -ème unité motrice. les vecteurs  $z$ ,  $s_i$  et  $\epsilon$  sont de taille  $N$ , où  $N$  est le nombre de points du signal observé. Les RI  $(h_i)_i$  sont choisies de taille  $P$ .

Imposant un train d'impulsions d'amplitude uniforme telle que  $s_i = 1_{x_i}$  a pour but d'obtenir un modèle simplifié, alors qu'en réalité les amplitudes des potentiels issues

de la même unité motrice varie légèrement au cours d'enregistrement. Cette variabilité est prise en compte par une variable aléatoire gaussienne de moyenne unitaire connue dans l'approche MCMC du chapitre 4. Un schéma du modèle d'observation  $z$  est illustré dans la figure 1.3. La modélisation par un système linéaire implique certaines conditions d'enregistrement des signaux EMG :

1. la contraction musculaire est isométrique (la longueur du muscle en contraction est maintenue constante durant l'enregistrement), et la durée d'enregistrement suffisamment courte pour éviter les variations importantes des potentiels d'action [Fee et al. 1996] ;
2. l'électrode insérée dans les muscles ne change pas de position ni d'orientation pendant la contraction.

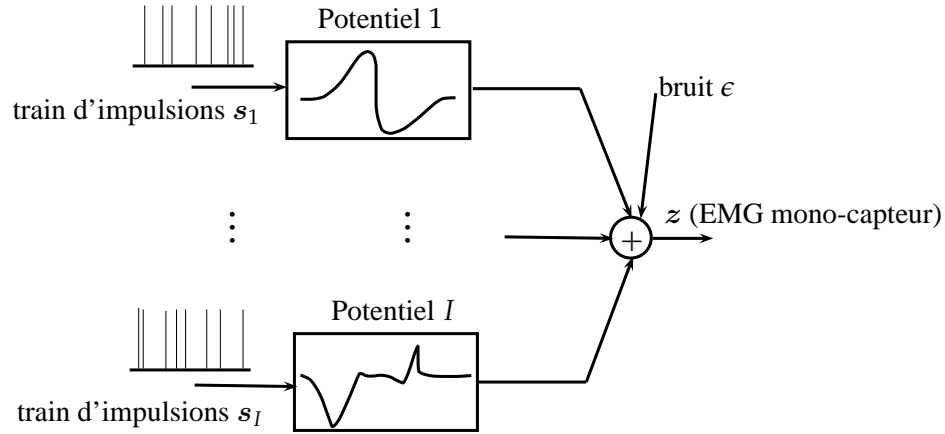


FIG. 1.3 – Modèle d'un signal EMG intramusculaire mono-capteur.

En discrétisant le système, les instants d'arrivée du processus  $s_i$  sont limités aux instants d'échantillonnage. Mais une simple recherche locale par interpolation trigonométrique [McGill et Dorfman 1984, McGill Jul 2002] permet de mieux aligner les potentiels. On se contente donc ici de résoudre le problème discrétisé ([McGill Jul 2002] traite le problème d'optimisation locale des instants d'impulsions en tant que paramètres continus).

L'hypothèse blanc gaussien i.i.d. est faite sur le bruit additif  $\epsilon$ , telle que la densité de la loi du signal EMG de longueur  $N$ , connaissant  $(x_i, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2$ , s'écrit :

$$P(z | (x_i, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2) = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\epsilon^2}} \right)^N \exp \left( -\frac{\|z - \sum_i s_i * h_i\|^2}{2\sigma_\epsilon^2} \right), \quad (1.2)$$

où  $\sigma_\epsilon^2$  est la variance du bruit  $\epsilon$ .

### 1.3.2 Les lois *a priori*

On précise alors les lois *a priori* concernant  $(h_i, s_i)_i$ . De nombreux constats physiologiques sont déjà faits à propos de la régularité des trains d'impulsions : au cours d'une contraction musculaire isométrique, les intervalles de temps entre impulsions (*interspike interval*, ISI) suivent approximativement une distribution d'allure gaussienne. Cette régularité peut être illustrée par l'histogramme d'un train d'impulsions (voir exemple dans la figure 1.4) obtenu par une méthode de décomposition manuelle [McGill et al. 1985].

Le raccourci  $(\bullet)_i$  remplace dans la suite l'ensemble  $\{\bullet, i = 1, \dots, I\}$ , e.g.,  $(s_i)_i = \{s_i, i = 1, \dots, I\}$ . Ces contraintes physiologiques conduisent à la modélisation suivante :

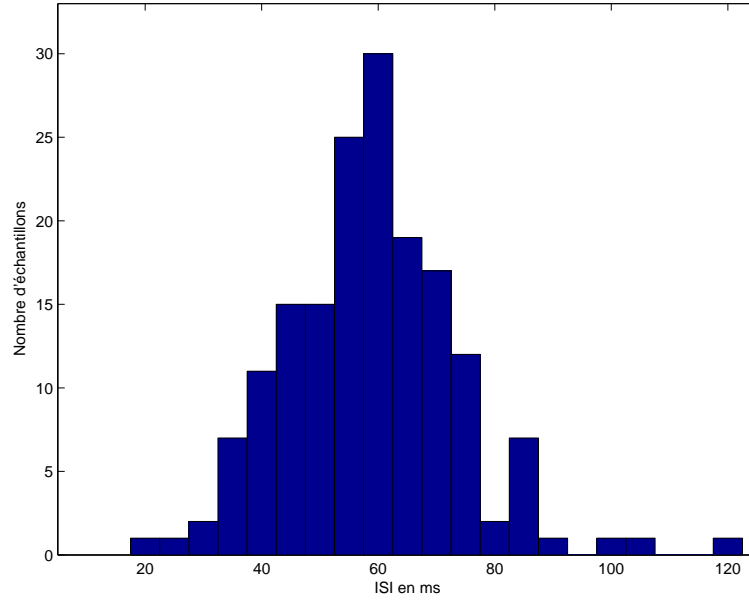


FIG. 1.4 – Histogramme des échantillons d'ISI extraits d'un train d'impulsions d'une durée de 10 secondes

1. les sources (trains d'impulsions  $(s_i)_i$ ) sont indépendants ;
2. le terme  $x_{i,j+1} - x_{i,j}$  (ISI) est supérieur à la valeur seuil  $T_R$  ; cette contrainte physiologique fixe la période réfractaire des fibres musculaires ;
3. les intervalles entre impulsions  $T_{ij} = x_{i,j+1} - x_{i,j} - T_R, j = 1, \dots, n_i - 1$  sont indépendants et suivent une distribution discrète d'allure gaussienne tronquée (avec contrainte de positivité) de moyenne  $m_i$  et d'écart type  $\sigma_i$ , soit

$$P(T_{ij}) \propto \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} \exp\left(-\frac{(T_{ij} - m_i)^2}{2\sigma_i^2}\right) 1_{T_{ij}>0}$$

La contrainte de la période réfractaire s'exprime par la fonction indicatrice  $1_{T_{ij}>0}$  dans la loi. La génération d'un train d'impulsions est donc décrite par :

$$P(x_i | m_i, \sigma_i^2) \propto (2\pi\sigma_i^2)^{-(n_i-1)/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_i^2} \sum_{j=1}^{n_i-1} (x_{i,j+1} - x_{i,j} - m_i - T_R)^2\right\} 1_{\mathcal{C}}(x_i) \quad (1.3)$$

$$1_{\mathcal{C}}(x_i) = \prod_{j=1}^{\dim(x_i)-1} 1_{x_{i,j+1} - x_{i,j} > T_R} \quad (1.4)$$

$$n_i = \dim(x_i) \quad (1.5)$$

Soit  $\mathcal{C}$  l'ensemble de  $x_i$  satisfaisant la condition de la période réfractaire tel que  $1_{\mathcal{C}}(x_i) = 1$  si  $x_i \in \mathcal{C}$  et 0 sinon. La même représentation apparaît dans Kail et al. [2009b] pour modéliser un processus de Bernoulli modifié dans l'objectif d'interdire les impulsions *collées*. Par conséquent, le processus  $s_i = 1_{x_i}$  n'est pas un processus i.i.d. En toute rigueur, il faudrait multiplier l'équation (1.3) par un terme lié à une loi *a priori* sur le premier instant  $x_{i1}$ , qui est implicitement supposée constante.

4. la variable  $T_{ij}$  est contrôlée par  $(\sigma_i/m_i)$ , supposée inférieure à la valeur seuil  $\text{Th}_{\sigma_i}$ . Physiologiquement, le niveau de l'écart type  $\sigma_i$  est de l'ordre de 10 à 20% de la moyenne [De Luca 1979, Lefever et De Luca 1982, McGill et al. 1985], ce qui exprime la régularité des trains d'impulsions  $(s_i)_i$ .

La modélisation pour chaque train d'impulsions par (1.3) est donc motivée par à la fois la contrainte physiologique de la période réfractaire  $T_R$  et la régularité des ISI comme illustrée sur la figure 1.4.

La loi *a priori* de  $s_i$  est donc proportionnelle au produit de  $(n_i - 1)$  lois gaussiennes tronquées i.i.d. si tous les intervalles  $x_{i,j+1} - x_{i,j}$  sont supérieures à  $T_R$  et nulle dans le cas contraire. Les effets de bord ne sont pas pris en compte dans l'équation (1.3). En particulier, la probabilité du premier ISI  $P(T_{i,1} > x_{i,1} - T_R)$  et celle du dernier  $P(T_{i,n_i+1} > N - x_{i,n_i} - T_R)$  ne sont pas considérées pour les raisons suivantes :

1. dans la procédure de l'enregistrement des signaux EMG intramusculaires, on sauvegarde non seulement l'ensemble de la période de contraction musculaire auquel on s'intéresse, mais aussi quelques secondes de repos au début et à la fin de la contraction. Par conséquent, la loi sur  $T_{ij}$  régie par les mêmes paramètres  $\{\sigma_i, m_i\}$  ne peut pas caractériser l'ensemble du train d'impulsions enregistré sous des conditions physiologiques différentes.
2. l'expression exacte de  $P(T_{i,1} > x_{i,1} - T_R)$  (et  $P(T_{i,n_i+1} > N - x_{i,n_i} - T_R)$  respectivement) n'est pas analytique. On peut tout au plus obtenir une approximation par  $\text{erfc}\left(\frac{x_{i,1}-T_R-m_i}{\sqrt{2}\sigma_i}\right)$  (et  $\text{erfc}\left(\frac{N-x_{i,n_i}-T_R-m_i}{\sqrt{2}\sigma_i}\right)$  respectivement), c'est-à-dire par des intégrales calculées pour le cas continu.

D'après l'hypothèse sur l'indépendance des sources  $(s_i)_{i,}$ , on obtient le résultat suivant :

$$P((x_i)_i | (m_i, \sigma_i^2)_i) = \prod_{i=1}^I P(x_i | m_i, \sigma_i^2). \quad (1.6)$$

Il convient de noter qu'en réalité, principalement deux types de corrélations existent entre les trains d'impulsions appartenant aux différentes unités motrices. Le premier appelé modulation commune (« common drive ») fait référence à la corrélation des variations de la fréquence d'impulsions entre les paires d'unités motrices [Luca et al. 1982]. Le deuxième appelé synchronisation des unités motrices (« MU synchrony ») [Dietz et al. 1976, De Luca 1979], est caractérisé par le fait que la simultanéité ou la quasi-simultanéité des impulsions des différentes unités motrices se produit plus souvent qu'en cas des processus indépendants. Ce phénomène est typiquement observé sous la présence de fatigue, tremblement physiologique, niveau élevé de la force de contraction musculaire, et certains d'autres états pathologiques [De Luca 1979]. Récemment est développé un simulateur des trains d'impulsions [Jiang et al. 2007] fondé sur le modèle simplifié de Hodgkin-Huxley (HH) [Hodgkin et Huxley 1952] prenant compte de ces deux mécanismes sous-jacents. Or, ces deux aspects de corrélations potentiellement intéressants ne sont pas modélisés dans la présente étude afin d'obtenir un modèle simple en structure. Dans ce cas, l'hypothèse d'indépendance dans la modélisation implique une difficulté d'exploiter les données de nature dépendante et non une propriété physique.

### 1.3.3 La distribution *a posteriori* jointe

Dans le cadre bayésien, on souhaite établir la distribution *a posteriori* jointe pour les paramètres inconnus  $\{(x_i, m_i, \sigma_i^2, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2 | z\}$ . On obtient en appliquant la loi de Bayès :

$$P((x_i, m_i, \sigma_i^2, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2 | z) \propto P(z | (x_i, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2) \prod_{i=1}^I (P(x_i | m_i, \sigma_i^2) P(m_i) P(\sigma_i^2) P(h_i)) P(\sigma_\epsilon^2) \quad (1.7)$$

L'équation (1.2) et (1.3) fournissent les deux premiers termes de la distribution *a posteriori* (1.7). Les lois *a priori* conjuguées sont ensuite choisies pour  $(m_i, \mathbf{h}_i, \sigma_i^2)_i, \sigma_\epsilon^2$  :

$$m_i \sim \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2), \quad \sigma_i^2 \sim \mathcal{IG}(\alpha_i, \beta_i), \quad (1.8)$$

$$\mathbf{h}_i \sim \mathcal{N}(\mathbf{h}_i^{(0)}, \sigma_h^2 \mathbf{I}_P), \quad \sigma_\epsilon^2 \sim \mathcal{IG}(\alpha_s, \beta_s), \quad (1.9)$$

où  $\mathbf{I}_P$  représente la matrice d'identité de dimension  $P$  et  $\mathcal{IG}$  la distribution gamma inverse.

Les lois *a priori* sont paramétrées de façon à ne pas privilégier des valeurs particulières. Par exemple, le choix de  $\mu_0, \sigma_0^2$  exprime l'information préalable sur la fréquence d'impulsions de chaque unité motrice et la pertinence de ces informations. Typiquement, la plupart des fréquences d'impulsions physiologiques est comprise entre 5Hz et 30Hz, soit une ISI entre  $[30, 200]$ ms. La loi gaussienne sur  $m_i$  dont la région  $[\mu_0 - 3\sigma_0, \mu_0 + 3\sigma_0]$  recouvre cet intervalle (c'est-à-dire  $[30, 200] \text{ms} \subset [\mu_0 - 3\sigma_0, \mu_0 + 3\sigma_0]$ ) peut être interprétée comme « peu informative ». La même remarque s'applique au choix de  $\sigma_h^2$  qui contrôle l'incertitude des formes initialisées par  $(\mathbf{h}_i^{(0)})_i$ . Ces formes approximatives des potentiels d'action obtenues par un pré-traitement automatique (voir Sect. 2.1) sont utilisées comme connaissance *a priori*.

Un résumé de la structure hiérarchique du modèle bayésien peut être visualisé sur un graphe orienté (directed acyclic graph ou DAG) sur la Figure 1.5.

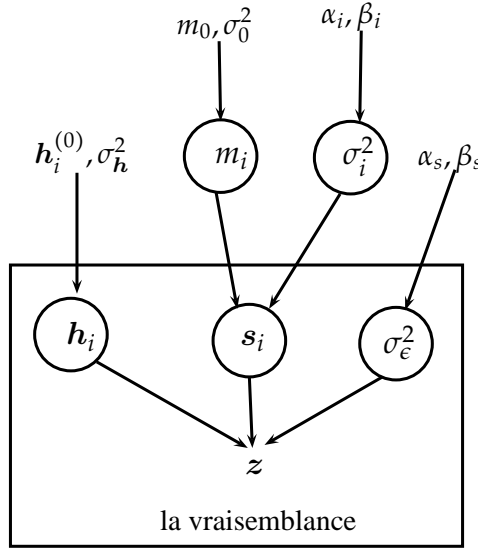


FIG. 1.5 – DAG du modèle bayésien hiérarchique. Les paramètres à estimer sont entourés de cercles.

# PRÉTRAITEMENT ET OPTIMISATION PAR LA RECHERCHE TABOU

# 2

On propose dans ce chapitre une première méthode de décomposition du signal EMG par maximisation itérative de la loi *a posteriori* [Ge et al. 2009]. L'algorithme de décomposition se déroule en deux phases :

1. le prétraitement permet d'augmenter le RSB du signal EMG, segmenter le signal parcimonieux et finalement obtenir les formes approximatives des potentiels  $(h_i^{(0)})_i$  ainsi que déterminer le nombre d'unités motrices  $I$  ;
2. la décomposition complète par maximisation itérative restitue les trains d'impulsions et les autres paramètres du modèle décrit au chapitre 1.

Les techniques de prétraitement (voir section 2.1) sont inspirées des travaux dans la littérature Lefever et De Luca [1982], McGill [Jul 2002], McGill et al. [Dec 2005], Wood et Black [2008]. Une contribution de cette thèse en est l'adaptation à un cadre non supervisé.

Dans la deuxième phase correspond à l'algorithme de décomposition complète, et traite notamment la superposition des potentiels. On cherche à maximiser itérativement la loi *a posteriori* conjointe par rapport aux inconnus (trains d'impulsions  $(x_i)_i$  et formes de potentiels  $(h_i)_i$ ) et tous les hyperparamètres du modèle bayésien  $((m_i, \sigma_i^2)_i, \sigma_e^2)$ . Les lois conditionnelles des paramètres continus sont analytiques et on en déduit les maxima directement. Pour le paramètre discret (séquence binaire)  $(s_i)_i$ , la recherche de « Tabou » est choisie afin d'explorer plus librement les différentes combinaisons de superposition. La section 2.2 présente l'algorithme « Tabou », puis son application au problème de la décomposition du signal EMG. Une stratégie supplémentaire dans cette approche déterministe consiste à maximiser conjointement les paramètres discrets dans deux segments consécutifs, pour éviter la propagation d'erreur (voir section 2.2.6).

La méthode est validée (voir section 2.3) sur les signaux EMG simulés par Farina *et al.* Farina et al. [2001], pour lesquels on connaît les trains d'impulsions de chaque unité motrice. Par rapport à la décomposition effectuée par un opérateur expert sur les signaux expérimentaux à 5% et 10% de la « Contraction Maximal Volontaire » (MVC), la méthode a abouti à une précision de  $89,0 \pm 1,6\%$ .

## 2.1 PRÉTRAITEMENT DES DONNÉES

Ce prétraitement correspond à la phase 1 de l'organigramme de décomposition de la figure 2.1. Il est nécessaire pour les raisons suivantes :

1. le filtrage passe-bande [Lefever et De Luca 1982, McGill et al. 1985] permet d'accroître les activités (potentiels d'action) par rapport aux autres activités de fond ;

2. la segmentation des données filtrées réduit la charge de calcul dans la deuxième phase « décomposition complète » ; un seuillage est utilisé grâce à une estimation rapide de l'écart type du bruit par la méthode de l'ADEMG [McGill et al. 1985],
3. la classification des potentiels d'action isolés détermine le nombre d'unités motrices présentes et leurs formes approximatives de potentiels  $h_i^{(0)}$ , une information ensuite utilisée comme connaissance *a priori* pour la deuxième phase.

Le prétraitement est rapide. Par exemple, l'estimation de l'écart type du bruit est obtenue sur une durée réduite du signal EMG (souvent les deux premières secondes, c'est-à-dire 20000 points pour un signal EMG échantillonné à 10kHz) en supposant que le niveau de bruit reste constant durant l'enregistrement (ce qui est conforme à l'hypothèse i.i.d. sur le bruit  $\epsilon$ ).

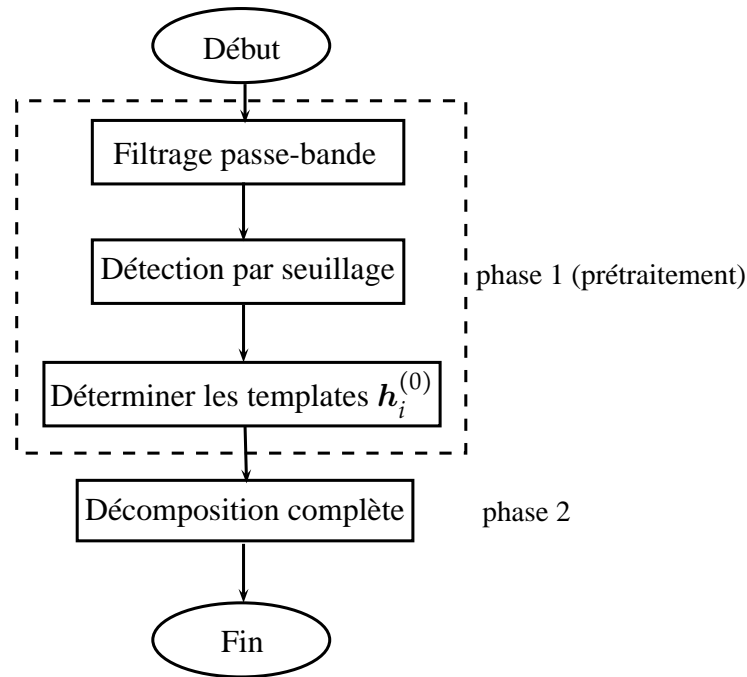


FIG. 2.1 – Organigramme du programme décomposition.

### Filtrage passe-bande

Le filtrage passe-bande est choisi pour éliminer deux sources de perturbations dans les données brutes EMG :

1. les potentiels issus des fibres musculaires éloignées de l'électrode ont subi un filtrage passe-bas caractéristique des tissus musculaires [Lefever et De Luca 1982]. Ceux qui sont plus proches correspondent aux potentiels plus piqués. Un filtre passe-haut permet donc de ne sélectionner que des potentiels venant des fibres proches et de rejeter les activités de fond ;
2. les bruits thermiques inhérents à l'appareil d'enregistrement (électromyographe) contiennent principalement des composantes haute fréquence, d'où le besoin d'un filtre passe-bas.

L'analyse spectrale du signal brut, échantillonné à 10kHz (figure 2.2) montre un pic basse-fréquence à 50Hz (pollution du réseau électrique) et un pic haute-fréquence à 3443Hz (qui correspond à l'ondulation périodique dans la représentation temporelle de la figure 2.2(a)). On constate les effets suivants en choisissant un filtre numérique

passse-bande de *Chebyshev Type II* avec une bande passante allant de 100Hz à 2500Hz et une atténuation de 40dB dans les bandes filtrées :

1. on élimine les deux sources de bruits (voir l'analyse fréquentielle sur le signal filtré dans la figure 2.2) tout en gardant les aspects piqués des potentiels d'action ;
2. mais on a aussi modifié l'allure de ces potentiels ; les signaux avant et après filtrage sont représentés à titre de comparaison.

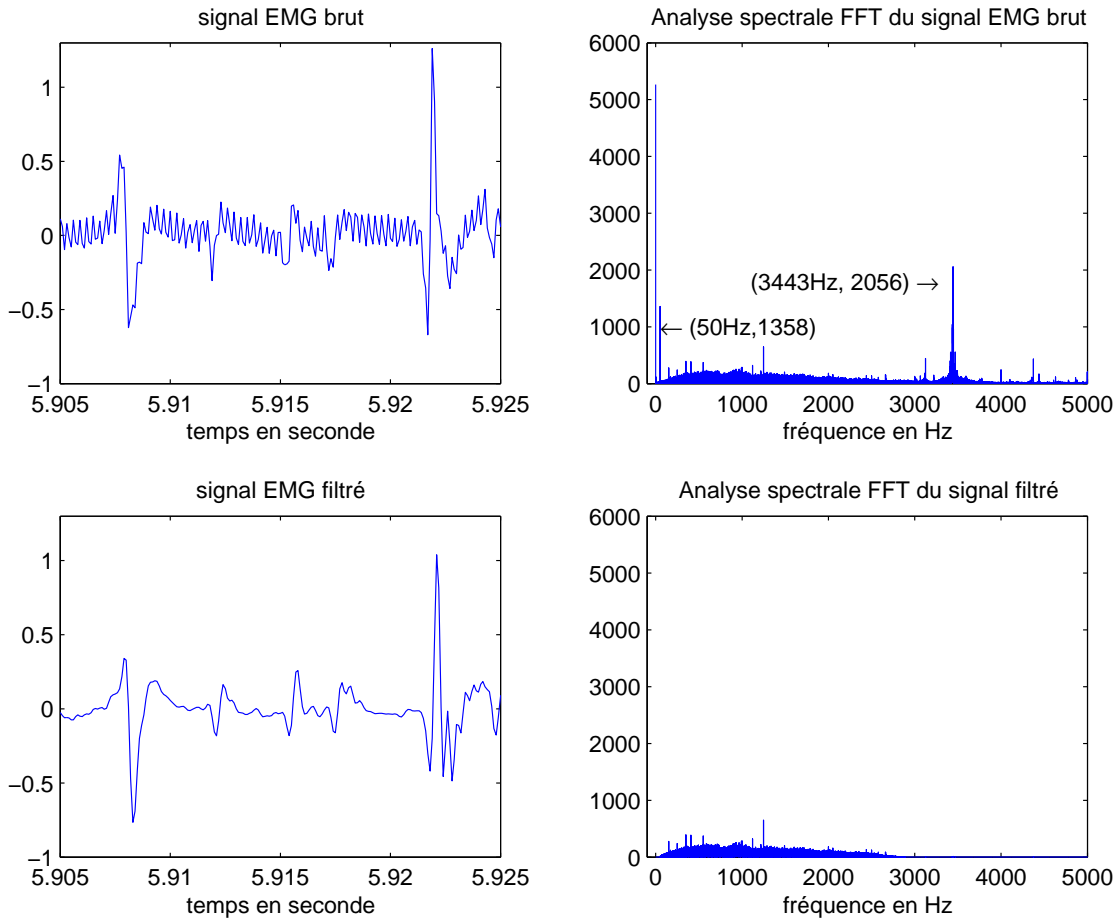


FIG. 2.2 – Comparaison temporelle et fréquentielle du signal EMG brut et filtré. 4 potentiels sont présents dans l'intervalle de 20ms.

Il convient de noter que le filtrage passe-bande constitue une opération peu coûteuse et efficace en terme d'élimination des bruits permettant une augmentation de niveau du RSB, dont le calcul sera détaillé dans le paragraphe suivant.

### Détection par seuillage

L'objectif de la détection par seuillage (segmentation) est de réduire le coût d'estimation des trains d'impulsions  $(1_{x_i})_i$  dans la deuxième phase. On propose donc de séparer le signal en intervalles temporels (segments d'activités) où les potentiels d'action isolés ou superposés sont présents (et en éliminant les portions qui ne contiennent que du bruit) ; ensuite, l'espace des solutions admissibles  $(x_i)_i$  est limité aux segments d'activité, ce qui évite une recherche sur l'ensemble du support temporel. La détection est réalisée par la méthode de seuillage, dont la valeur  $S$  est déterminée par la



TAB. 2.1 – Statistiques des durées des segments en fonction de la longueur des potentiels  $P$  (en ms) et le coefficient  $c_1$  dans l'estimation de  $S$ . Le jeu d'essai est réalisé sur un signal EMG réel composé des potentiels de 8 unités motrices et d'une durée totale de 10 secondes. Le format dans chaque case est « la durée totale (moyenne par segment, écart type) en ms ».

$c_1 \backslash P(\text{ms})$	4	5	6	7	8	9
3	5164.3(16.0 7.9)	5762.3(20.5 10.2)	6302.0 (24.5 12.0)	6787.4(29.7 15.5)	7218.7(35.9 19.4)	7599.3(42.2 22.0)
4	4164.2(13.2 5.7)	4763.3(16.5 7.2)	5321.9(20.0 8.5)	5831.1(24.5 10.9)	6285.7(29.7 14.6)	6689.3(34.3 16.1)
5	2753.6(11.1 3.3)	3228.0(13.9 4.8)	3678.2(16.8 5.6)	4107.8(19.6 6.5)	4515.0(23.0 8.5)	4896.7(26.4 10.0)

résolution de l'équation implicite suivante [McGill et al. 1985] :

$$S = c_1 \sqrt{\underbrace{\sum_{n=1}^T z_n^2 I(S, n) / \sum_{n=1}^T I(S, n)}_{\widehat{\sigma}_\epsilon}} \quad (2.1)$$

où  $z$  désigne le signal EMG préfiltré,  $T$  la longueur du test (souvent  $T < N$ , e.g., correspondant aux 2 secondes initiales), et  $I(S, n)$  la fonction binaire telle que :

$$I(S, n) = \begin{cases} 1, & \text{si } |z_n| < S \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.2)$$

La valeur de seuillage  $S$  est fixée à  $c_1 \cdot \widehat{\sigma}_\epsilon$ , où l'expression  $\widehat{\sigma}_\epsilon$  elle même dépend de  $S$  dans l'équation (2.1). La valeur de  $c_1$  est fixée empiriquement et la solution de  $S$  est trouvée en  $\mathcal{O}(T)$  par l'algorithme de McGill et Dorfman [1984], McGill et al. [1985] :

- 1:  $v \leftarrow$  classer  $|z|$  dans l'ordre croissant ;
- 2:  $v_d(l) \leftarrow \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^l v(j)^2}{l}}$ , pour  $l = 1, \dots, T$
- 3:  $\text{Idx} \leftarrow \max \{j \mid c_1 v_d(j) > v(j)\}$
- 4:  $S \leftarrow v(\text{Idx})$

Les extrema locaux de  $z$  dont les valeurs absolues sont supérieures à  $S$  sont retenus comme pics de potentiels d'action. La figure 2.3 montre les résultats de la détection des pics après l'estimation de  $S$  : les 2 niveaux tracés par les lignes pointillées correspondent à  $\pm S$  et les étoiles aux pics des potentiels. Un nouveau segment est créé lorsque la distance entre deux extrema consécutifs dépasse  $2P + 1$ ,  $P$  étant la longueur de chaque  $h_i$ . Dans la figure 2.3, deux segments sont illustrés et délimités par les crochets ; le début et la fin de chaque segment sont obtenus par extension de  $P$  instants (à gauche et à droite respectivement) par rapport aux extrema consécutifs dépasse  $2P + 1$ . Les longueurs des segments dépendent donc de plusieurs paramètres : la parcimonie de  $z$  (essentiellement en fonction du nombre d'unités motrices et de la force de contraction musculaire), le coefficient  $c_1$  pour l'estimation de  $S$ , la longueur  $P$  de chaque  $h_i$ , etc.

Au titre d'exemple, un signal EMG composé de 8 unités motrices et à 10% de la force maximale de contraction, recense une durée totale des segments actifs à 5.322 secondes sur 10 secondes d'enregistrement pour  $P = 6\text{ms}$  et  $c_1 = 4$  (voir tableau 2.1). La segmentation réduit par un facteur d'environ 2 la complexité de la décomposition complète dans la deuxième phase, en supposant que celle-ci reste linéairement croissante par rapport aux longueurs des segments (voir Sect. 2.2).

Un sous produit de la détection par seuillage est l'estimation de l'écart type du bruit  $\widehat{\sigma}_\epsilon \approx S/c_1$ . Elle permet de justifier le filtrage passe-bande sur  $z$  en comparant les

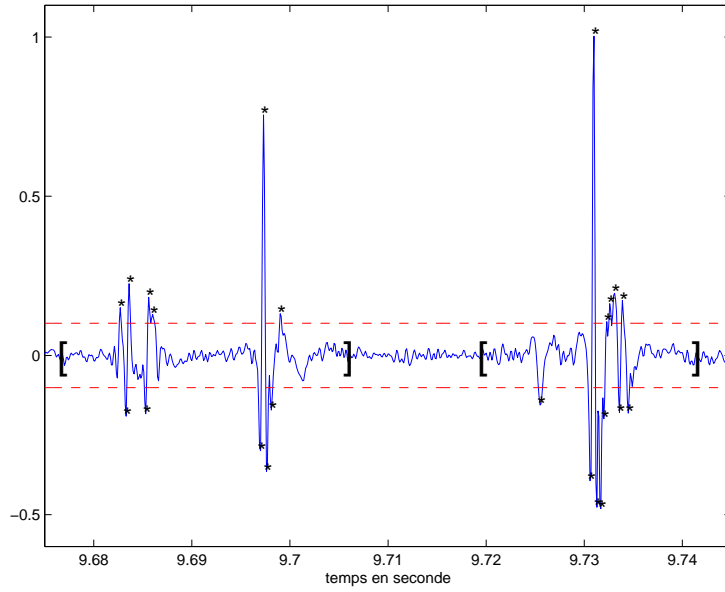


FIG. 2.3 – Détection des extrema des potentiels d'action après le seuillage : les étoiles sont des extrema locaux dépassant  $S$  (lignes pointillées) en module.  $S$  est déterminé en choisissant  $c_1 = 4$  et  $T = 20000$ .

niveaux de RSB sur les deux versions de signal EMG :

$$\text{RSB}_{\text{dB}} = 10 \log_{10} \left( \frac{\sum_{n=1}^N z_n^2}{N} \right) / \sigma_\epsilon^2. \quad (2.3)$$

Sur le même jeu de donnée, le RSB post-filtrage s'élève à 9.83dB contre 1.95dB (EMG brut), soit un gain d'autour de 8dB par un simple filtrage numérique. Dans d'autres enregistrements de signaux EMG, on constate un gain allant de 3dB au 9dB par la même méthode du filtrage passe-bande et l'estimation de  $S$ .

### Déterminer les formes approximatives $(h_i^{(0)})_i$ et le nombre d'unités

L'objectif de cette étape est de fournir une approximation du potentiel  $h_i^{(0)}$  pour chacune des unités motrices à partir des résultats de segmentation précédents. Ces formes approximatives seront utilisées plus tard dans la phase de décomposition complète, en tant que connaissance *a priori* sur la forme des potentiels.

L'algorithme suivant est inspiré de nombreux travaux dans la littérature, dont les performances sont souvent limitées par la superposition des potentiels [Lewicki 1998]. C'est la raison pour laquelle on ne l'applique que sur les segments contenant un unique potentiel.  $z^{(k)}$  désigne le signal EMG dans le  $k^{\text{ème}}$  segment :

- 1: sélectionner les 20% des segments les plus courts, en supposant que ceux-ci ne contiennent qu'un seul potentiel, ce qui est réaliste compte tenu de la parcimonie du signal EMG traité ;
- 2: recalcr les potentiels sélectionnés par alignement de la valeur maximale ( $\arg \max_i |z_i^{(k)}|$ ) ;
- 3: partitionner l'ensemble des potentiels par une méthode de classification non supervisée.

Plusieurs pistes sont disponibles pour classifier les segments contenant un unique potentiel : l'idée générale est de se ramener à un espace de représentation de dimension réduite (par rapport aux longueurs des potentiels) pour réduire le coût de la procédure de classification. L'espace de représentation peut correspondre à des statistiques morphologiques (différence crête à crête des potentiels, nombre de phases, durée, etc) [Wheeler et Heetderks 1982], ou des coefficients de transformée de Fourier [McGill et al. 1985, Stashuk et De Bruin 1988], ou la projection sur les premiers axes d'une analyse en composantes principales [Wood et Black 2008]. Ensuite, la classification peut être effectuée par une méthode de type « k-Means » [Lloyd 1982], mais une telle méthode ne résout pas le problème de l'estimation du nombre d'unités motrices (chacune caractérisée par une forme de potentiel).

On teste ici deux méthodes de classification capables non seulement d'estimer les formes des potentiels isolés, mais aussi de déterminer le nombre de classes  $I$ . La première méthode est une classification bayésienne non-paramétrique proposée par Wood et Black [2008] (dont l'algorithme est détaillé dans l'annexe A.2). Les premiers coefficients issus de PCA sont utilisés ; chaque potentiel est donc représenté par  $\mathbf{h}_k \approx \sum_{d=1}^D y_k^d \mathbf{u}_d$  où  $(y_k^d)_d$  sont les coefficients et  $(\mathbf{u}_d)_d$  les axes principaux. Pour  $D = 2$  et  $D = 3$ , l'approximation représente 73% et 80% de variance des potentiels respectivement. Dans la modèle de Wood et Black [2008], le nombre de classes (choix du modèle) est intégré analytiquement grâce au modèle du mélange de gaussiennes infinis (« Infinite Gaussian Mixture Model », IGMM) [Rasmussen 2000], une alternative à l'algorithme de saut réversible MCMC (« reversible-jump Markov chain Monte Carlo », RJMCMC) proposée par Nguyen et al. [2003] dans la classification des potentiels. La méthode de Wood et Black [2008] par simulation stochastique consiste à générer une chaîne de Markov dont chaque échantillon est un vecteur de labels de classe attribués aux potentiels (vecteurs des coefficients issus du PCA, de dimension réduite). Le nombre de classes est libre d'évoluer d'un échantillon à l'autre par rajout ou suppression de classes via le processus de restaurant chinois (« chinese restaurant process », CRP), ce dernier étant dérivée de la loi conditionnelle du modèle IGMM.

Les figures 2.5 (a) et (b) montrent le résultat de la méthode bayésienne non-paramétrique de Wood et Black [2008]. Un signal EMG d'une durée de 10 secondes recense 311 segments (potentiels isolés ou superposés) dont les premiers 20% les plus courts sont utilisés pour la classification. Ces segments correspondent à une durée entre 5 et 6-ms, soit entre 50 et 60 points pour un EMG échantillonné à 10kHz. Les coordonnées de chaque point dans (a) représentent les deux directions principales d'un potentiel à l'issue de l'analyse PCA, et le chiffre signifie le numéro de classe attribué par la classification. Les contours en ellipse sont calculés à partir des matrices de covariance associées à chaque classe. (b) illustre les formes représentatives de  $\mathbf{h}_i^{(0)}$  calculées par moyennage pour chaque classe.

La deuxième méthode consiste à calculer l'erreur quadratique des coefficients de la transformée de Fourier recadrée (« canonically registered discrete Fourier transform », ou CRDFT) [McGill et Dorfman 1984, McGill et al. 1985]. Cette méthode a l'avantage de mieux aligner temporellement les potentiels par interpolation des coefficients de la transformée de Fourier discrète. Le principe est simple : un décalage temporel d'un potentiel se traduit par un terme multiplicatif de phase dans les coefficients de la transformée de Fourier. Soit  $\mathbf{h}(t)$  un potentiel d'action continu dont la bande fréquentielle est limitée dans  $[0, 1/2T]$  (la fréquence de Nyquist) et la durée temporelle limitée dans  $[0, NT]$ . Une approximation de  $\mathbf{h}(t)$  par les  $N$  échantillons  $\mathbf{h}_n = \mathbf{h}(nT)$ ,  $n = 0, \dots, N-1$

sera obtenue par :

$$\mathbf{h}(t) \approx \widehat{\mathbf{h}}(t) = \frac{\mathbf{H}_0}{N} + \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N/2-1} \left[ \mathbf{H}_k \exp\left(\frac{j2\pi kt}{NT}\right) + \mathbf{H}_k^* \exp\left(\frac{-j2\pi kt}{NT}\right) \right], 0 \leq t \leq NT \quad (2.4)$$

où  $\mathbf{H}_k$ ,  $k = 0, \dots, N-1$  représente la transformée de Fourier discrète (DFT) de la série  $\mathbf{h}_n$  et «  $*$  » la conjuguée d'une valeur complexe. Dans ce contexte, un potentiel d'action discrétisé et décalé d'une fraction  $\phi T$  de la période d'échantillonnage  $\mathbf{h}((n+\phi)T)$  voit ses coefficients de la DFT multipliés par un terme de phase :

$$\mathbf{H}_{k,\phi} = \mathbf{H}_k \exp\left(\frac{j2\pi k\phi}{N}\right), k = 0, \dots, N-1, \quad (2.5)$$

où  $\mathbf{H}_{k,\phi}$  est la (DFT) de  $\mathbf{h}((n+\phi)T)$ . On en déduit l'expression de l'erreur quadratique entre deux potentiels décalés de  $\phi T$  :

$$e^2 = \sum_{n=0}^{N-1} |\mathbf{h}((n+\phi)T) - \mathbf{g}(nT)|^2 = \frac{1}{N} |\mathbf{H}_0 - \mathbf{G}_0|^2 + \frac{2}{N} \sum_{k=1}^{N/2-1} |\mathbf{H}_{k,\phi} - \mathbf{G}_k|^2 \quad (2.6)$$

où la deuxième égalité est l'application directe du théorème de Parseval. La méthode de McGill et Dorfman [1984] minimise d'abord le critère  $e^2$  par rapport au paramètre de décalage  $\phi$  (scalaire correspondant au recalage) par la méthode de Newton. Ensuite  $\mathbf{h}((n+\phi_{\text{opt}})T)$  est fusionné avec  $\mathbf{g}$  dans la même classe et un nouveau  $\mathbf{g}$  est créé par moyennage pondéré si la condition  $e^2/|\mathbf{g}|^2 < 10\%$  est remplie [McGill et Dorfman 1984] ; et une nouvelle classe est née pour  $\mathbf{h}$  sinon.

On montre sur la figure 2.4 l'histogramme des décalages temporels qui optimisent les erreurs quadratiques des coefficients de CRDFT par la méthode de Newton. On constate que la convergence est locale en appliquant la méthode de Newton ; la valeur de  $\phi_{\text{opt}}$  est comprise dans une période d'échantillonnage.

Les résultats de la classification par la deuxième méthode sont illustrés dans la figure 2.5(c)(d) pour le même signal EMG. Dans (c) sont affichés tous les potentiels classifiés par la méthode de McGill et Dorfman [1984] et leurs moyennes  $(\mathbf{h}_i^{(0)})_i$  sont illustrées dans (d). On y trouve les mêmes nombres de classes pour les deux méthodes. De plus, les formes de  $\mathbf{h}_i^{(0)}$  sont identifiables à une permutation près (la numérotation des labels reste arbitraire). Déterminer le nombre de sources (unités motrices) reste néanmoins un problème ouvert, et ce surtout lorsque les potentiels isolés deviennent moins fréquents dans les signaux EMG dont la valeur MVC est élevée. Les méthodes de classification proposées sont valable pour l'application sur les signaux EMG testés ( $\text{MVC} \leq 10\%$ ).

On privilégie dans la suite la méthode de McGill et Dorfman [1984], plus facile à implémenter et efficace à exécuter (en  $\mathcal{O}(N)$  pour  $N$  segments) que la méthode par simulation stochastique [Wood et Black 2008]. Il faudra néanmoins noter que les deux méthodes ne sont plus performantes lorsque les segments contiennent deux ou plusieurs potentiels superposés : le nombre de classes explose dû aux formes très variées des superpositions, d'où le besoin d'une sélection préalable des segments contenant un unique potentiel.

## 2.2 MÉTHODE PAR MAXIMISATION ITÉRATIVE

Cette section décrit la méthode pour la deuxième phase : la décomposition complète du signal EMG par l'algorithme de maximisation itérative sur la loi *a posteriori* afin

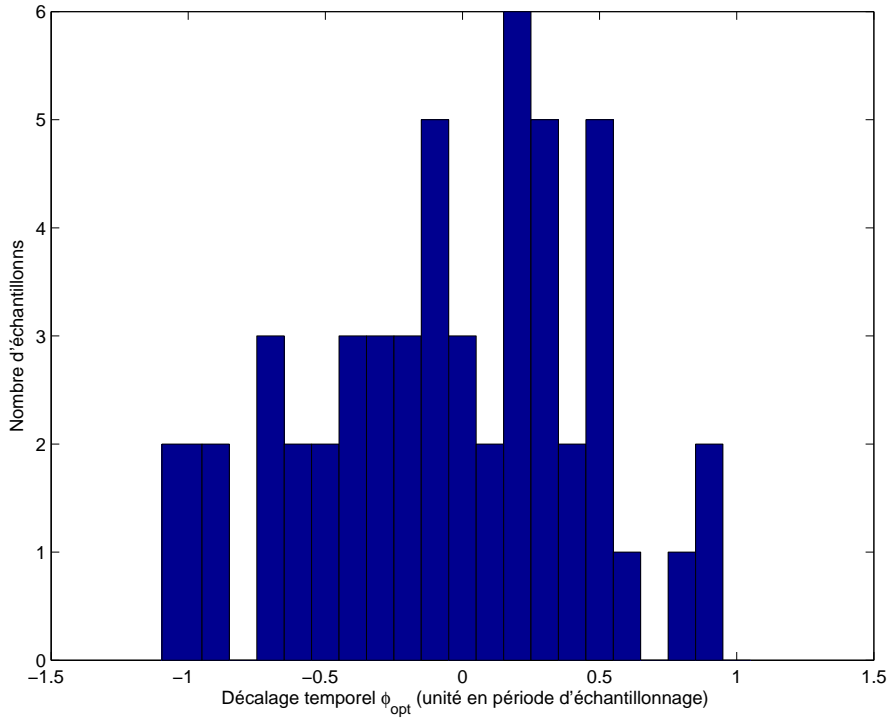


FIG. 2.4 – Histogramme des décalages temporels optimisés  $\phi_{opt}$  par la méthode de Newton.

d'obtenir un estimateur MAP. Le modèle est donné dans le chapitre 1 pour lequel la loi jointe *a posteriori* dans l'équation (1.7) est à maximiser par rapport aux paramètres inconnus :

$$\hat{\Theta} = \arg \max_{\Theta} P(\Theta | z),$$

où  $\Theta = \{(x_i, h_i, m_i, \sigma_i^2)_i, \sigma_\epsilon^2\}$ .

Pour  $(x_i)_i$  fixé, la maximisation par rapport aux paramètres continus  $\{(h_i, m_i, \sigma_i^2)_i, \sigma_\epsilon^2\}$  est analytique. Par contre, le problème de maximisation discrète par rapport aux trains d'impulsions  $(x_i)_i$  n'a pas de solution explicite. D'autre part, une exploration exhaustive est extrêmement coûteuse [Lewicki 1994; 1998]. Estimer  $(x_i)_i$  consiste à déterminer les classes de sources (unités motrices) et les instants d'impulsions pour chaque source, en maximisant la loi *a posteriori* dans l'équation (1.7). L'espace des solutions admissibles  $(x_i)_i \in \mathcal{C}$ , y compris toutes les superpositions temporelles de toutes les combinaisons des sources, est exponentiel [Gut et Moschytz Sep 2000]. On propose ici la recherche « Tabou » [Glover 1989] dont la stratégie d'exploration consiste à imposer un déplacement dans un voisinage admissible, même si un optimum local est atteint. Nous précisons les principaux éléments de l'application dans cette section, tels que la fonction de coût à minimiser (équivalent à la maximisation de la loi marginale *a posteriori*), la définition du « voisinage admissible » (sous-ensemble atteignable par itération), et la structure de la liste de Tabou.

On donne d'abord le schéma de maximisation itérative :

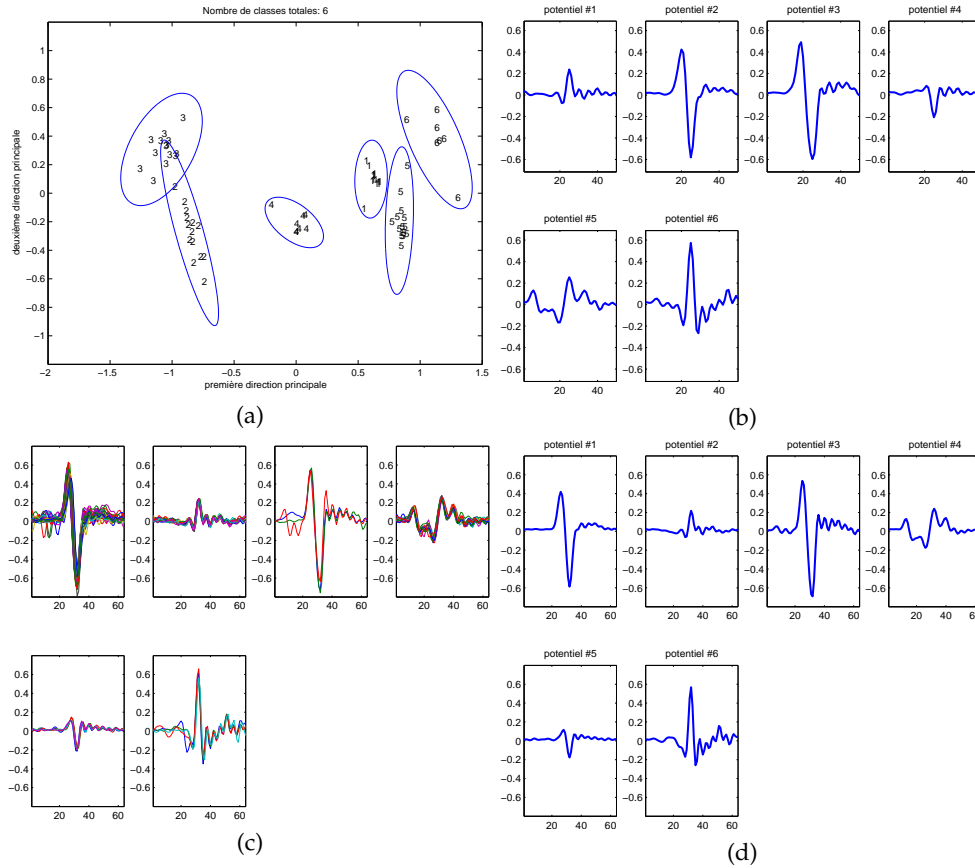


FIG. 2.5 – Comparaison des deux méthodes de classification appliquées aux potentiels isolés.

1. Initialiser  $(h_i^{(0)})_i$  potentiels approximatifs obtenus de la phase 1 ;
2. Initialiser  $(m_i, \sigma_i^2)_i$  par tirages suivant les lois *a priori*,  $\sigma_\epsilon = \widehat{\sigma}_\epsilon$  obtenu par l'équation (2.1) ;
3. Initialiser  $x_i = \emptyset$  ( $1_{x_i} = 0$ ) pour tout  $i$ .
4. Itérer :
  - a) Pour  $(x_i^{(k)})_i$  dans chaque  $\text{Seg}_k$ ,  $k = 1, \dots, K$   
Appliquer la recherche Tabou pour maximiser l'équation (1.7) en fixant les autres paramètres ;
  - b) Maximiser l'équation (1.7) par rapport aux paramètres continus  $(h_i)_i, (m_i)_i, (\sigma_i^2)_i, \sigma_\epsilon^2$  itérativement ;
 jusqu'à convergence

Dans ce schéma, on note  $x_i^{(k)} = x_i \cap \text{Seg}_k$ ,  $i = 1, \dots, I$  le train d'impulsions de la  $i$ -ième unité motrice dans le  $k$ -ème segment et les exposants  $(-k)$  dans la suite indiquent les variables appartenant à  $\cup_{j \neq k} \text{Seg}_j$ . L'algorithme proposé maximise itérativement la loi (1.7) par rapport à  $\Theta$  et conduit à un estimateur MAP  $\widehat{\Theta}$ . Dans l'étape 4(a), le maximum est cherché itérativement pour chaque segment par l'algorithme Tabou ; maximiser la loi conjointe (1.7) en fixant les autres paramètres est équivalent à maximiser la loi conditionnelle  $P((x_i^{(k)})_i | \text{reste})$  par rapport à  $(x_i^{(k)})_i$ . Concrètement, la recherche du maximum est effectuée dans une série de voisinages admissibles à partir de la configuration initiale de  $(x_i^{(k)})_i$ . La définition de voisinage est décrite ultérieurement.

Les lois conditionnelles des paramètres continus sont précisées dans la suite.

### 2.2.1 Loi conditionnelle de $(\mathbf{h} | \Theta \setminus \mathbf{h}, \mathbf{z})$

Partant de l'équation (1.7), on peut déduire la loi conditionnelle de  $\mathbf{h}$  comme suit :

$$\begin{aligned} P(\mathbf{h} | \Theta \setminus \mathbf{h}, \mathbf{z}) &\propto P(\mathbf{z} | (\mathbf{s}_i)_i, \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2) P(\mathbf{h}) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} |\mathbf{z} - \mathbf{M}\mathbf{h}|^2\right) P(\mathbf{h}) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} |\mathbf{z} - \mathbf{M}\mathbf{h}|^2 - \frac{1}{2\sigma_h^2} |\mathbf{h} - \mathbf{h}^{(0)}|^2\right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

où  $\mathbf{h} = [\mathbf{h}_1; \dots; \mathbf{h}_I]$  représente la version concaténée des  $(\mathbf{h}_i)_i$  et  $\mathbf{M} = [\mathbf{M}_1, \dots, \mathbf{M}_I]$ , dans laquelle chaque  $\mathbf{M}_i, i = 1, \dots, I$  est une matrice Toeplitz de convolution telle que  $\mathbf{M}_i \mathbf{h}_i = \mathbf{1}_{x_i} * \mathbf{h}_i$ . Il s'ensuit que  $\mathbf{M}\mathbf{h} = \sum_{i=1}^I \mathbf{1}_{x_i} * \mathbf{h}_i$ . Par ailleurs,  $P(\mathbf{h})$  est la loi  $\mathcal{N}(\mathbf{h}^{(0)}, \sigma_h^2 \mathbf{I}_{PI})$  suivant l'équation (1.9).  $\mathbf{h}^{(0)} = [\mathbf{h}_1^{(0)}; \dots; \mathbf{h}_I^{(0)}]$  est un vecteur de taille  $PI \times 1$ , construit par concaténation.  $\mathbf{I}_{PI}$  représente la matrice d'identité de dimension  $PI \times PI$ .

$P(\mathbf{h} | \Theta \setminus \mathbf{h}, \mathbf{z})$  est donc une loi gaussienne multivariée  $\mathcal{N}(m_h, \Sigma_h)$ , où

$$\Sigma_h^{-1} = \sigma_h^{-2} \mathbf{I}_{PI} + \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{M}^t \mathbf{M} \quad (2.8)$$

$$m_h = \Sigma_h \left( \sigma_h^{-2} \mathbf{h}^{(0)} + \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{M}^t \mathbf{z} \right) \quad (2.9)$$

Pour la distribution gaussienne, on trouve donc :

$$m_h = \arg \max_{\mathbf{h}} P(\mathbf{h} | \Theta \setminus \mathbf{h}, \mathbf{z}). \quad (2.10)$$

On peut également envisager de maximiser la loi *a posteriori* par rapport aux  $\mathbf{h}_i$  itérativement les uns après les autres, avec un schéma qui calcule  $I$  fois les moyennes des gaussiennes multivariées  $P(\mathbf{h}_i | \Theta \setminus \mathbf{h}_i, \mathbf{z}), i = 1, \dots, I$ , chacune de dimension  $P$ . On note que l'évaluation de  $m_h$  fait intervenir l'inversion d'une matrice  $PI \times PI$  alors que la version itérative nécessite  $I$  fois l'inversion de matrices de dimension  $P \times P$ . Malgré son coût de calcul plus élevé, on privilège le schéma de maximisation conjointe pour assurer une convergence plus rapide en terme d'itérations par rapport à une remise-à-jour « bloc par bloc » de la loi cible.

Les sous matrices hors diagonales de  $\Sigma_h^{-1}$  s'écrivent sous forme de  $\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{M}_i^t \mathbf{M}_j, i \neq j$  d'après l'équation (2.8); elles sont donc proportionnelles à la corrélation des deux trains d'impulsions  $\mathbf{s}_i$  et  $\mathbf{s}_j$ . En effet,  $\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{M}_i^t \mathbf{M}_j = \mathbf{0}_P, i \neq j$  si l'on a

$$|x_{i,k} - x_{j,l}| > P, \forall k, l \quad (2.11)$$

soit pour tout couple d'instantanés d'impulsions  $(x_{i,k}, x_{j,l})$  de  $\mathbf{s}_i$  et  $\mathbf{s}_j$ , ils se sont écartés au moins de  $P$  instants d'échantillonnage (la longueur d'un potentiel), c'est-à-dire il n'existe pas de superposition de potentiels des deux unités.

La matrice  $\Sigma_h^{-1}$  sera diagonale par bloc (de taille  $P \times P$ ) si  $\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{M}_i^t \mathbf{M}_j = \mathbf{0}_P, \forall i \neq j$  (il n'y a donc pas de superposition de potentiels). Dans ce cas, maximiser  $\mathbf{h}$  conjointement conduit aux mêmes résultats que de maximiser itérativement par rapport aux  $(\mathbf{h}_i)_i$ , de même pour les coûts de calcul d'inversion matricielle, car on doit inverser une matrice diagonale par bloc de taille  $PI \times PI$ . Dans le cas contraire, plus il y a de superpositions de potentiels, plus les blocs hors-diagonaux de la matrice  $\Sigma_h^{-1}$  sont importants, et donc la maximisation conjointe s'avère plus avantageuse.

### 2.2.2 Loi conditionnelle de $(m_i | \Theta \setminus m_i, z)$

Pour tout  $i = 1, \dots, I$ , la loi conditionnelle de  $P(m_i | \Theta \setminus m_i, z)$  s'écrit d'après l'équation (1.7) sous forme de :

$$\begin{aligned} P(m_i | \Theta \setminus m_i, z) &\propto P(\mathbf{x}_i | m_i, \sigma_i^2) P(m_i) \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2} \sum_{j=1}^{n_i-1} (T_{ij} - m_i)^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_0^2} (m_i - \mu_0)^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Le deuxième terme correspond à la loi *a priori* conjuguée de  $m_i$  tandis que  $\{T_{ij} = \mathbf{x}_{i,j+1} - \mathbf{x}_{i,j} - T_R\}$  est l'ensemble des ISI (intervalle entre impulsions ou *inter-spike interval*) extraits de  $\mathbf{x}_i$ . On en déduit directement que la loi conditionnelle  $P(m_i | \Theta \setminus m_i, z)$  est une gaussienne  $\mathcal{N}(\bar{m}_i, \bar{\sigma}_i^2)$  en posant :

$$\bar{\sigma}_i^{-2} = \sigma_0^{-2} + (n_i - 1)\sigma_i^{-2}, \quad \bar{m}_i = \bar{\sigma}_i^2 \left( \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} + \frac{\sum_{j=1}^{n_i-1} T_{ij}}{\sigma_i^2} \right) \quad (2.13)$$

où  $\bar{m}_i$  est la solution de la maximisation. Il est à noter que les  $I$  moyennes  $(m_i)_i$  sont indépendantes (conditionnellement aux autres variables). La maximisation conjointe est donc rigoureusement équivalente aux  $I$  maximisations successives ci-dessus.

### 2.2.3 Loi conditionnelle de $(\sigma_i^2 | \Theta \setminus \sigma_i^2, z)$

Pour tout  $i = 1, \dots, I$ , la loi conditionnelle de  $P(\sigma_i^2 | \Theta \setminus \sigma_i^2, z)$  s'écrit d'après l'équation (1.7) sous forme de :

$$\begin{aligned} P(\sigma_i^2 | \Theta \setminus \sigma_i^2, z) &\propto P(\mathbf{x}_i | m_i, \sigma_i^2) P(\sigma_i^2) \\ &\propto \sigma_i^{-(n_i-1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2} \sum_{j=1}^{n_i-1} (T_{ij} - m_i)^2 \right\} \text{IG}(\sigma_i^2; \alpha_i, \beta_i) \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\text{IG}(x; \alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{-(\alpha+1)} \exp \left( -\frac{\beta}{x} \right) \quad (2.15)$$

où  $\text{IG}(x; \alpha, \beta)$  représente la distribution inverse gamma de  $x$  paramétrée par  $(\alpha, \beta)$ , dont le maximum se trouve à  $\beta/(\alpha + 1)$ . On trouve donc que  $P(\sigma_i^2 | \Theta \setminus \sigma_i^2, z)$  est la loi  $\text{IG}(\sigma_i^2; \bar{\alpha}_i, \bar{\beta}_i)$  avec :

$$\bar{\alpha}_i = \alpha_i + \frac{n_i - 1}{2} \quad \bar{\beta}_i = \beta_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n_i-1} (T_{ij} - m_i)^2 \quad (2.16)$$

Le maximum se trouve donc en  $\bar{\beta}_i/(\bar{\alpha}_i + 1)$ . La même remarque sur la version de maximisation conjointe s'applique sur  $(\sigma_i^2)_i$  sachant que la loi conditionnelle conjointe est séparable :  $P((\sigma_i^2)_i | \Theta \setminus (\sigma_i^2)_i, z) = \prod_{i=1}^I P(\sigma_i^2 | \Theta \setminus \sigma_i^2, z)$ . On se contente donc d'un balayage scalaire de  $\sigma_i^2, i = 1, \dots, I$ .

### 2.2.4 Loi conditionnelle de $(\sigma_\epsilon^2 | \Theta \setminus \sigma_\epsilon^2, z)$

La loi conditionnelle de  $P(\sigma_\epsilon^2 | \Theta \setminus \sigma_\epsilon^2, z)$  s'écrit d'après l'équation (1.7) sous forme de :

$$\begin{aligned} P(\sigma_\epsilon^2 | \Theta \setminus \sigma_\epsilon^2, z) &\propto P(z | (\mathbf{x}_i, \mathbf{h}_i)_i, \sigma_\epsilon^2) P(\sigma_\epsilon^2) \\ &\propto \sigma_\epsilon^{-N} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} \|z - \mathbf{M}\mathbf{h}\|^2 \right\} \text{IG}(\sigma_\epsilon^2; \alpha_s, \beta_s) \end{aligned} \quad (2.17)$$



On trouve donc que  $P(\sigma_\epsilon^2 | \Theta \setminus \sigma_\epsilon^2, z)$  est la loi inverse gamma paramétrée par  $(\bar{\alpha}_s, \bar{\beta}_s)$  avec :

$$\bar{\alpha}_s = \alpha_s + \frac{N}{2}, \quad \bar{\beta}_s = \beta_s + \frac{\|z - \mathbf{M}h\|^2}{2} \quad (2.18)$$

Le maximum se trouve donc en  $\bar{\beta}_s/(\bar{\alpha}_s + 1)$ .

### 2.2.5 Maximisation par rapport à $(x_i^{(k)})_i$

L'approche de la recherche Tabou [Glover 1989] est appliquée sur l'étape 4(a). Le problème d'optimisation se résume par :

$$\text{Minimiser : } c(y) \in \mathcal{R}, y \in Y. \quad (2.19)$$

où la fonction de coût  $c(y)$  est une fonction réelle, et  $Y$  l'espace des configurations possibles pour  $y$ . On associe à chaque  $y \in Y$  un ensemble  $\text{voisin}(y) \subset Y$ , composé des mouvements envisageables à partir de  $y$ . Un sous-ensemble  $T \subset Y$ , appelé *liste de Tabou*, contenant les mouvements déjà parcourus est géré par une structure de mémoire de type « FIFO » (*First In First Out*). L'ensemble des mouvements admissibles à partir de  $y$  est noté  $\text{voisin}(y) \setminus T$ , c'est-à-dire les voisins de  $y$  privés des configurations récemment parcourues. Pour traiter le problème d'optimisation (2.19), l'algorithme Tabou est décrit dans le tableau 2.2.

TAB. 2.2 – Algorithme Tabou

```

1: Initialiser  $y^* \leftarrow y_0 \in Y, m \leftarrow 0, T \leftarrow \emptyset$ 
2: tant que  $m < M$  et  $\text{voisin}(y_m) \setminus T \neq \emptyset$  faire
3:    $m \leftarrow m + 1$ 
4:    $y_m \leftarrow \arg \min \{c(y) \mid y \in \text{voisin}(y_{m-1}) \setminus T\}$ 
5:   si  $c(y_m) < c(y^*)$  alors
6:      $y^* \leftarrow y_m$ 
7:   fin si
8:   Ajouter  $y_m$  dans  $T$ 
9: fin tant que

```

**Remarque 2.1** Les mouvements vers de moins bonnes configurations sont rendus possibles grâce à l'étape 4, car on n'a pas nécessairement  $c(y_m) \leq c(y_{m-1})$ . Cette technique permet d'explorer plus efficacement l'espace  $Y$ , notamment pour sortir des optima locaux [Glover 1989].

**Remarque 2.2** Les configurations déjà visitées sont incluses dans  $T$  pour un certain nombre d'itérations (en fonction de la mémoire FIFO), et donc sont exclues des mouvements admissibles pour certaines itérations suivantes.

On commence par préciser la fonction de coût dans l'application de Tabou. On pose  $n_i^{(k)} = \dim(x_i^{(k)})$ , soit le nombre d'impulsions de la  $i$ -ième unité motrice, dans le

segment  $\text{Seg}_k$ . Il s'ensuit que

$$\begin{aligned}
 & \arg \max_{(\mathbf{x}_i)_i^{(k)}} P((\mathbf{x}_i)_i^{(k)} | (\mathbf{x}_i^{(-k)}, \mathbf{h}_i, m_i, \sigma_i^2)_i, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z}) \\
 &= \arg \max_{(\mathbf{x}_i)_i^{(k)}} \exp \left\{ -\frac{\|\mathbf{z}^{(k)} - \sum_{i=1}^I \mathbf{h}_i * 1_{\mathbf{x}_i}^{(k)}\|^2}{2\sigma_\epsilon^2} \right\} \\
 & \quad \prod_{i=1}^I \sigma_i^{-n_i^{(k)}} \exp \left( -\sum_{j=0}^{n_i^{(k)}} \frac{(\mathbf{x}_{i,j+1}^{(k)} - \mathbf{x}_{i,j}^{(k)} - m_i - T_R)^2}{2\sigma_i^2} \right) 1_{C_k}(\mathbf{x}_i^{(k)}) \\
 &= \arg \min_{(\mathbf{x}_i)_i^{(k)} \in C_k} \frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} \left\| \mathbf{z}^{(k)} - \sum_{i=1}^I \mathbf{h}_i * 1_{\mathbf{x}_i}^{(k)} \right\|^2 + \sum_i n_i^{(k)} \log \sigma_i + \sum_i \sum_{j=0}^{n_i^{(k)}} \frac{(\mathbf{x}_{i,j+1}^{(k)} - \mathbf{x}_{i,j}^{(k)} - m_i - T_R)^2}{2\sigma_i^2},
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

où  $\mathbf{x}_{i,0}^{(k)}$  et  $\mathbf{x}_{i,n_i^{(k)}+1}^{(k)}$  désignent l'instant de la dernière impulsion dans  $\text{Seg}_{k-1}$  et celui de la première dans  $\text{Seg}_{k+1}$  respectivement. Du point de vue bayésien, le premier terme de la fonction du coût (l'équation (2.20)) s'identifie comme la vraisemblance de  $(\mathbf{h}_i, 1_{\mathbf{x}_i})_i$ , alors que les deux derniers termes sont issus de l'information *a priori* (sur la régularité et la parcimonie) des trains d'impulsions.

**Remarque 2.3** L'ensemble  $C_k \subset \{0,1\}^{\dim(\text{Seg}_k)}$  contient toutes les configurations satisfaisant la condition de la période réfractaire dans le  $k$ -ième segment conditionnellement aux autres paramètres, notamment  $\mathbf{x}_{i,0}^{(k)}$  et  $\mathbf{x}_{i,n_i^{(k)}+1}^{(k)}$  du  $\text{Seg}_{k-1}$  et  $\text{Seg}_{k+1}$  respectivement.  $C_k$  dépend donc de  $(\mathbf{x}_i)_i^{(k)}$ . La fonction indicatrice  $1_{C_k}(\mathbf{x}_i^{(k)})$  s'écrit sous forme de la contrainte du problème d'optimisation (2.20). On vérifie que  $P((\mathbf{x}_i)_i^{(k)} | \text{reste}) = 0$  (ou la fonction du coût  $c((\mathbf{x}_i)_i^{(k)}) = +\infty$ ) lorsqu'il existe un couple  $(x_{i,j+1}, x_{i,j})$  tel que  $x_{i,j+1} - x_{i,j} \leq T_R$  dans la configuration. La même règle s'applique également dans l'étude de maximisation conjointe de la section suivante.

Dans la suite, l'exposant (ou l'indice)  $(k)$  est omis sans ambiguïté car seul  $(\mathbf{x}_i)_i^{(k)}$  est considéré dans chaque segment. On précise les éléments suivant pour l'application de la recherche Tabou :

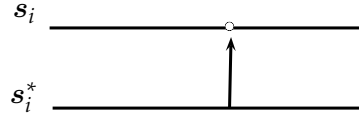
1.  $y = (\mathbf{x}_i)_i$  and  $Y = C \subset \{0,1\}^{\dim(\text{Seg}_k) \cdot I}$  définit une solution particulière et l'espace de solution respectivement ;
2. La fonction du coût  $c(y)$  est exprimée dans l'équation (2.20) ;
3.  $T$  (Tabou list) est remis à jour pour mémoriser les solutions précédentes, caractérisées par les labels des unités motrices et les instants d'impulsions ;
4. pour une solution donnée,  $\text{voisin}((\mathbf{x}_i)_i)$  est défini par :

$$\left\{ (\mathbf{x}_i^*)_i \in C \left| \sum_i |1_{\mathbf{x}_i^*} - 1_{\mathbf{x}_i}|_1 \leq 2 \text{ et } \sum_i |n_i^* - n_i| < 2 \right. \right\} \tag{2.21}$$

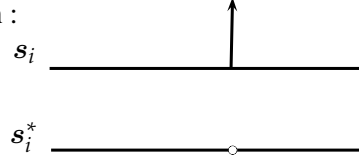
où  $|\cdot|_1$  est la norme- $L_1$  d'un vecteur (ou la norme de Hamming dans le cas d'une séquence binaire).

La figure 2.6 résume les trois familles de configurations incluses dans la définition (2.21), c'est-à-dire ajouter une impulsion dans une unité motrice, supprimer une impulsion existante, ou déplacer temporellement une impulsion dans la même unité motrice.

Ajouter une impulsion :



Supprimer une impulsion :



Déplacer dans la même UM :

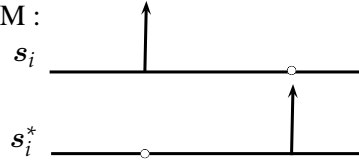


FIG. 2.6 – Illustration des trois configurations dans le voisinage défini par (2.21). Un seul train  $s_i^*$  est différent de  $s_i$ .

Il est vérifié que cette définition de voisin permet d'ajouter ou enlever une impulsion pour une unité motrice, ou translater une impulsion déjà existante. En plus, la définition satisfait aux conditions suivantes :

1.  $(x_i)_i \in \text{voisin}((x_i)_i)$
2.  $(x_i)_i^* \in \text{voisin}((x_i)_i) \Leftrightarrow (x_i)_i \in \text{voisin}((x_i)_i^*)$

La complexité par itération de la recherche Tabou est proportionnelle au nombre de configurations  $|\text{voisin}((x_i)_i)|$ . Dans le cas extrême et défavorable où  $T_R = 0$ , ce nombre est égal à  $(I + \sum_i n_i) \cdot \dim(\text{Seg}) - \sum_i n_i^2$ , soit approximativement  $(I + \sum_i n_i) \cdot \dim(\text{Seg})$  pour  $\dim(\text{Seg}) \gg n_i$  ; il est donc linéaire par rapport à  $I$  (nombre d'unité motrice) et  $\dim(\text{Seg})$  (longueur du segment courant). Dans le cas contraire ( $T_R > 0$ ), ce nombre sera plus petit, par élimination des  $(x_i)_i \notin \mathcal{C}$ . Par contre, le cardinal d'un sous-ensemble de  $\mathcal{C}$  comptant au plus une impulsion par unité motrice dans le segment s'élève à  $(1 + \dim(\text{Seg}_k))^I$  ; c'est une borne inférieure, pourtant très élevée, du nombre de configurations, d'où la difficulté de maximiser par une exploration exhaustive dans  $\mathcal{C}$ .

Néanmoins, la définition du voisinage est limitée par le nombre de changements possibles, à cause de l'accroissement rapide du cardinal lorsqu'on augmente la distance dans la définition (2.21). Le choix de voisinage est donc un compromis entre la complexité et l'efficacité du mouvement par itération.

### 2.2.6 Maximisation conjointe de $(x_i)_i$ dans deux segments

La maximisation itérative segment par segment peut converger vers des minima locaux des configurations de  $(x_i)_i$  dans certains cas. Ce phénomène est observé quand les deux conditions suivantes sont réunies (voir section 2.3.5 pour illustration) :

1. les potentiels des deux ou plusieurs sources sont similaires ;
2. deux segments consécutifs sont séparés par un intervalle inférieur à  $T_R$ .

Les deux conditions peuvent induire une erreur de type « label switching » dans les deux segments concernés, c'est-à-dire détecter dans un segment une impulsion d'une autre unité motrice parce que les probabilités conditionnelles sont proches pour les deux configurations. Ensuite, l'erreur provoque une autre détection erronée dans le segment adjacent. Une illustration de « label switching » d'une paire de potentiels

(#5,#7) est donnée dans la figure 2.8 où chaque segment recense un faux positif et un faux négatif par rapport à la référence. Il suffit alors d'invertir les étiquettes des potentiels dans les deux segments.

On propose une solution par maximisation conjointe par rapport aux  $(x_i)_i$  dans deux segments consécutifs par recherche Tabou. Cette maximisation conjointe sera utilisée quand les deux segments consécutifs sont séparés de moins de  $T_R$ .

Pour formaliser, on définit les trains d'impulsions dans deux segments consécutifs par un vecteur concaténé :  $x_i^{(k,k+1)} = [x_i^{(k)}; x_i^{(k+1)}]$ , où  $k$  et  $k+1$  désigne les indices des segments.  $z^{(k,k+1)}$  comprend l'intervalle des deux segments et le bruit entre segments. En plus, on note  $n_i^{(k,k+1)} = n_i^{(k)} + n_i^{(k+1)}$ , la somme des impulsions détectées dans les deux segments pour chaque unité motrice. La fonction d'optimisation s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
 & \arg \max_{(x_i)_i^{(k,k+1)}} P((x_i)_i^{(k,k+1)} | (x_i)^{(k,k+1)}, h_i, m_i, \sigma_i^2, \sigma_e^2, z) 1_{C_{k,k+1}}((x_i)_i^{(k,k+1)}) \\
 &= \arg \min_{(x_i)_i^{(k,k+1)} \in C_{k,k+1}} \frac{1}{2\sigma_e^2} \left\| z^{(k,k+1)} - \sum_{i=1}^I h_i * 1_{x_i}^{(k,k+1)} \right\|^2 + \sum_i \sum_{j=0}^{n_i^{(k,k+1)}} \frac{(x_{i,j+1}^{(k,k+1)} - x_{i,j}^{(k,k+1)} - m_i - T_R)^2}{2\sigma_i^2} \\
 &+ \log \sigma_i \sum_i n_i^{(k,k+1)}. \tag{2.22}
 \end{aligned}$$

Comme dans l'équation (2.20),  $x_{i,0}^{(k,k+1)}$  et  $x_{i,n_i^{(k,k+1)}+1}^{(k,k+1)}$  représentent l'instant de la dernière impulsion pour la  $i$ -ième source dans  $\text{Seg}_{k-1}$  et celui de la première dans  $\text{Seg}_{k+2}$  respectivement. La définition de l'ensemble de « voisins » est étendue (voir définition (2.21) dans la section 2.2.5) sur la version concaténée  $(x_i)_i^{(k,k+1)}$ , permettant soit de rajouter une nouvelle impulsion, soit de supprimer, soit de translater une impulsion existante dans le support des deux segments. La notation de  $C_{k,k+1}$  est une extension naturelle de l'ensemble de configurations admissibles vis-à-vis de la période réfractaire sur les deux segments consécutifs. On note que dans l'approche conjointe le processus de maximisation itérative est effectué pour chaque  $k$ .

Avec ces modifications, une fausse configuration par « label switching » dans un segment n'est plus stable, car une translation de l'impulsion dans le segment adjacent permet de maximiser davantage la loi *a posteriori* (1.7). Les comparaisons sont faites dans la section 2.3.5 sur des signaux EMG réels, afin de confirmer la qualité de décomposition supérieure par l'approche de maximisation conjointe dans des cas complexes.

Finalement, l'approche par maximisation conjointe est limitée à deux segments, alors qu'idéalement une maximisation conjointe de tous les segments serait plus efficace au termes de nombre d'itérations. Mais le schéma devient moins intéressant en termes de complexité algorithmique, le nombre de configurations dans le voisinage est en  $\mathcal{O}((I + \sum_i n_i) \cdot (\sum_k \dim(\text{Seg}_k)))$ , où  $n_i$  est le nombre total des impulsions de la  $i$ -ème unité motrice pour l'ensemble du signal.

## 2.3 VALIDATION

Les tests de validation sont effectués sur un PC équipé d'un Intel Pentium 4 à 3.2GHz et d'une RAM de 3Go.

### 2.3.1 Simulation

L'outil de la simulation des signaux EMG conçu par Farina et al. [2001] est utilisé dans cette étude. Afin de mieux tester la performance de l'algorithme proposé, les paramètres de la simulation sont fixés de la manière suivante (voir [Farina et al. 2001] pour plus de détails sur le modèle) :

- 4-5 unités motrices sont activées et  $\Delta E_{\max} = 0.7$  (le niveau d'écart des énergies normalisées des potentiels issus d'unités différentes) ;
- les fréquences d'émission des unités motrices sont entre 10-15Hz ;
- le niveau de superposition des potentiels  $\alpha_{\%,\max} = 100\%$ , soit au maximum ;
- le pourcentage des potentiels superposés  $N_{\%s} = 70\%$ , soit 30% de potentiels sont isolés, toutes sources confondues ;
- $RSB_{dB} = 10dB$ .

Un total de 5 signaux EMG mono-capteur est généré avec une fréquence d'échantillonnage à 10kHz. La durée des signaux est de 10 secondes. Pour les tests suivants en simulation et en données réelles, on fixe  $T_R = 10ms$ , soit 100 échantillons.

### 2.3.2 Signaux réels

Les signaux EMG ont été enregistrés sur cinq sujets masculins dont l'âge se situe entre  $25.3 \pm 4.5$ . L'expérimentation est effectuée conformément à la déclaration de Helsinki, et approuvée par le comité local d'éthique. Un accord écrit est obtenu de la part des sujets.

Les enregistrements ont été obtenus à partir du muscle « abductor digiti minimi ». L'auriculaire a été fixé sur un support pour enregistrer la force exercée au cours d'une contraction isométrique du muscle (protocole développé au Politecnico di Torino, Turin, Italie). Les sujets ont effectué trois contractions maximales volontaires (MVC) de l'auriculaire ; deux essais sont séparés par une période de repos de 2 min. La force maximale enregistrée (qui correspond au MVC= 100%) sert de référence pour les autres contractions. Une paire de fils-électrodes en acier inoxydable couvert de Téflon (AM Systems, Carlsborg, WA, Etats-Unis, diamètre  $50\mu m$ ) est insérée dans le muscle grâce à l'aiguille de 25 G. Les fils sont dénudés de façon à exposer seulement la section transversale de la pointe. L'aiguille est insérée à une profondeur de quelques millimètres au-dessous des muscles et retirée pour laisser le fils-électrodes à l'intérieur du muscle. Le signal EMG intramusculaire analogique capturé par la pointe des fils-électrodes est amplifié (par Counterpoint EMG, DANTEC Medical, Skovlunde, Danemark), et ensuite filtré passe-bas (filtrage anti-repli à 5kHz) et échantillonné à 10 kHz. Une électrode de référence est placée autour du poignet durant l'enregistrement. Chaque sujet effectue deux contractions de 60-s correspondant aux MVC= 5% et 10% respectivement dans un ordre aléatoire et intercalés de 15 min de repos. On note que plus la force musculaire est élevée (correspondant à une valeur de MVC plus élevée), plus la fréquence d'impulsions de chaque unité motrice sera élevée, et par conséquent moins le signal sera parcimonieux et les cas de superpositions seront plus fréquents.

### 2.3.3 Critère de comparaison

Pour évaluer la performance des méthodes appliquées aux signaux réels, les trains d'impulsions sont d'abord estimés par un algorithme de décomposition validé (EMGLAB [McGill Jul 2002, McGill et al. Dec 2005]). Cet algorithme interactif inclut une interface utilisateur pour pouvoir éditer manuellement et visualiser les résultats [McGill et al. Dec 2005]. Sont affichés par l'algorithme un segment du signal EMG,

les potentiels d'action associés aux unités motrices identifiés, les trains d'impulsions détectés et un zoom sur un tronçon de signal à analyser. La régularité des trains d'impulsions est souvent une gage de qualité de décomposition tandis que les impulsions irrégulières indiquent les erreurs éventuelles de la décomposition. Pour assister à l'identification des impulsions non détectées, l'algorithme affiche les barres à l'endroit où les impulsions sont attendues pour chaque unité motrice. La portion du signal peut alors être visualisée à une échelle élargie. Le zoom affiche également les superpositions à une échelle élargie permettant la vérification visuelle de l'alignement des potentiels et des différentes combinaisons d'unités motrices choisies. Les commandes sont disponibles pour défaire les ajustements et supprimer ou fusionner les classes d'unités motrices. La décomposition des signaux EMG est donc manuellement ajustée et validée via cette interface utilisateur par un opérateur expert. La décomposition par EMGLAB a déjà été validée par McGill et al. [2004] en l'appliquant sur les signaux EMG enregistrés simultanément dans le même muscle et donc contenant les activités des mêmes sources d'unités motrices. Les trains d'impulsions ainsi obtenus par cette méthode sont utilisés comme référence.

Pour évaluer la qualité de décomposition par la méthode proposée, on utilise le critère introduit dans Luca et al. [2006] pour la  $i$ -ième unité motrice :

$$A(i) = \frac{N_{\text{réf}}(i) - N_{\text{FP}}(i) - N_{\text{FN}}(i)}{N_{\text{réf}}(i)} \times 100\%$$

où  $N_{\text{réf}}(i)$  est le nombre d'impulsions détectées par la méthode de référence (EMGLAB) pour la  $i$ -ième unité motrice.  $N_{\text{FN}}(i)$  et  $N_{\text{FP}}(i)$  sont les nombres de faux négatifs et de faux positifs en appliquant l'algorithme de décomposition non-supervisé. Une impulsion obtenue par la méthode proposée est considérée bonne si elle se trouve dans la fenêtre de 1ms centrée à l'instant de l'impulsion de référence pour la même source d'unité motrice. Luca et al. [2006] montre aussi qu'en prenant

$$A = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I A(i)$$

comme critère de qualité globale de décomposition, toutes les unités motrices auront la même importance quels que soient la forme, la durée des potentiels, et le nombre d'impulsions associées.

Par ailleurs,  $\sigma_i/m_i < 0.3$  correspond à une information *a priori* sur la régularité des trains d'impulsions de chaque source. Cette information n'a pas été prise en compte dans le modèle hiérarchique pour la simplicité ; mais elle est utilisée pour la validation *a posteriori* ; parmi les trains d'impulsions obtenus par la méthode proposée, ceux avec  $\sigma_i/m_i > 0.3$  sont automatiquement exclus de l'analyse ; on a constaté expérimentalement que ce critère de rejet conduisait à éliminer des composantes très peu énergétiques. Le critère de la qualité globale  $A$  est donc moyenné seulement sur les  $A(i)$  des unités motrices validées, soit  $\sigma_i/m_i < 0.3$ . La décomposition est effectuée sur une période de 10 secondes pour tous les signaux réels.

#### 2.3.4 Tests en simulation

La figure 2.7(a) montre une portion d'un signal EMG simulé. Les formes des potentiels sont illustrées dans la figure 2.7(c). Les labels sont attribués à chaque instant d'impulsion. Dans l'exemple, la décomposition prenait moins de 5 min par itération pour un signal EMG de 10-s échantillonné à 10kHz. Deux itérations sont calculées dans le test.

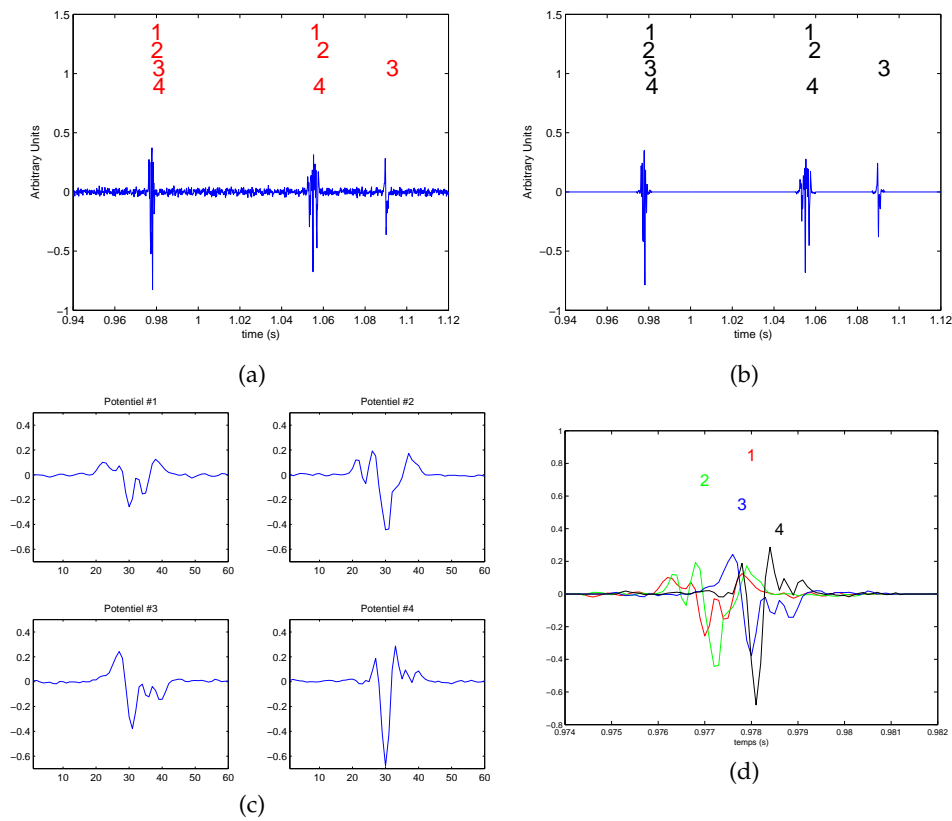


FIG. 2.7 – Exemple de décomposition par maximisation itérative segment par segment sur un signal EMG simulé. (a) Emg simulé avec labels d'impulsions (b) EMG reconstruit après la décomposition par les trains d'impulsions et les potentiels. (c) potentiels des unités motrices par la décomposition (d) zoom de la superposition des 4 potentiels dans le premier segment du (a)

La figure 2.7(d) montre la superposition des 4 potentiels dans un segment. On constate que le lobe positif du potentiel#3 est atténué par les lobes négatifs des potentiels #1 et #2, ce qui constitue un cas de superposition destructive.

Le tableau 2.3 montre les résultats de décomposition de 5 signaux simulés. Les trains d'impulsions obtenus sont validés si  $\sigma_i/m_i < 0.3$ , et le critère de la qualité  $A$  est calculé à partir des  $A(i)$  des trains validés. L'algorithme de maximisation segment par segment est suffisant pour la décomposition de tous les signaux EMG simulés. Ceci est dû au fait que les trains d'impulsions simulés ont une fréquence plus faible (10-15Hz) comparée aux données réelles (voir figure 2.10). « # UM » désigne le nombre d'unités motrices dans les signaux; « # Val » est le nombre d'unités motrices validées, pour lesquelles la condition de régularité d'impulsions est satisfaite.

TAB. 2.3 – Résultats de la décomposition des signaux EMG simulés (10 s)

	EMG#1	EMG#2	EMG#3	EMG#4	EMG#5
# UM	5	5	4	4	4
# Val	3	4	3	4	2
A	88.7%	88.0%	92.1%	88.5%	94.6%

### 2.3.5 Tests sur les signaux EMG réels

La comparaison des deux versions de décomposition par maximisation itérative est illustrée dans l'exemple de la figure 2.8. Contrairement aux simulations, la méthode de maximisation segment par segment n'est plus acceptable pour la décomposition des signaux EMG réels. Le signal EMG est enregistré lors d'une contraction correspondant à un niveau de MVC= 10%. On distingue les impulsions provenant de 7 unités motrices. Les labels marqués en haut de la figure 2.8 (a) et (b) sont obtenus par la décomposition manuelle utilisant EMGLAB ; au milieu de la figure 2.8 (a) et (b) sont affichées les reconstructions du signal EMG basées sur les résultats de décomposition (segment par segment et conjointement respectivement) ; et on trouve les erreurs résiduelles en bas. Les impulsions du couple d'unités motrices  $\{#5, #7\}$  dans la figure 2.8(a) sont situées dans deux segments adjacents (distance inférieure à 5ms) ; les formes de potentiels données dans la figure 2.8(c)(d) montrent un niveau d'énergie similaire. Un maximum local de  $(x_i)_i^{(k)}$  fait intervenir l'unité #7 au lieu de #5 dans le premier segment et cette erreur locale s'est propagée dans le segment suivant et provoque une erreur de type « label switching » parce qu'une impulsion de l'unité #7 dans le deuxième segment conduirait à un intervalle entre impulsions (ISI) anormalement petit et pénaliserait la fonction de coût par le terme portant sur la régularité du train  $1_{x_7}$ . La méthode par maximisation conjointe des deux segments rend la solution « plus globale » dans le sens où par rapport à la solution précédente ( voir figure 2.8(a)) l'erreur de la reconstruction est moindre, alors que la régularité des trains est quasiment inchangée. Et par conséquent elle maximise davantage la probabilité *a posteriori* (voir figure 2.8(b)).

A titre d'exemple, on donne quelques statistiques des résultats de prétraitement. Pour les signaux EMG contenant 8 unités motrices avec une force de contraction correspondant à un niveau de MVC= 10%, la somme des durées des segments utiles est environ la moitié de la durée d'enregistrement. Parmi tous ces segments, environ la moitié contient un unique potentiel. Le pourcentage de segments contenant des potentiels superposés est affiché pour l'ensemble des signaux EMG expérimentaux (tableau 2.5).

Pour mieux illustrer l'efficacité de la méthode de maximisation conjointe par rapport à la méthode segment par segment, les statistiques de décomposition pour chaque unité motrice sont montrées dans le tableau 2.4 sur un signal représentatif. FP et FN représentent le nombre de faux positifs et de faux négatifs respectivement, et TD le nombre total d'impulsions pour chaque unité motrice. Les résultats de maximisation segment par segment sont affichés en haut et ceux de maximisation conjointe en bas. La décomposition est effectuée sur un signal EMG intramusculaire d'une durée de 10 secondes et de MVC= 10%.  $\sigma/m < 0.3$  est la condition de validation pour chaque train d'impulsions. Trois sources sont validées sur cinq par application de la méthode de maximisation conjointe alors que seulement une des cinq l'est par la version segment par segment. Certains  $A(i)$  ne sont pas calculés car  $N_{FP}(i) + N_{FN}(i) > N_{réf}(i)$ . Certes dans un cas extrême, la qualité serait encore améliorée par maximisation conjointe par rapport à tous les segments (soit le signal EMG). Or, le coût de calcul par la recherche Tabou devient inacceptable parce que la dimension de l'ensemble « voisin » dépend de la longueur des segments (voir discussions dans la section 2.2.5 et 2.2.6) ; la méthode proposée ici s'avère être un compromis acceptable entre la qualité de la décomposition et le coût de calcul.

On récapitule ensuite dans le tableau 2.5 les résultats obtenus par application de la maximisation conjointe sur tous les signaux expérimentaux. Chaque colonne contient le pourcentage des segments contenant les potentiels superposés, le nombre total des



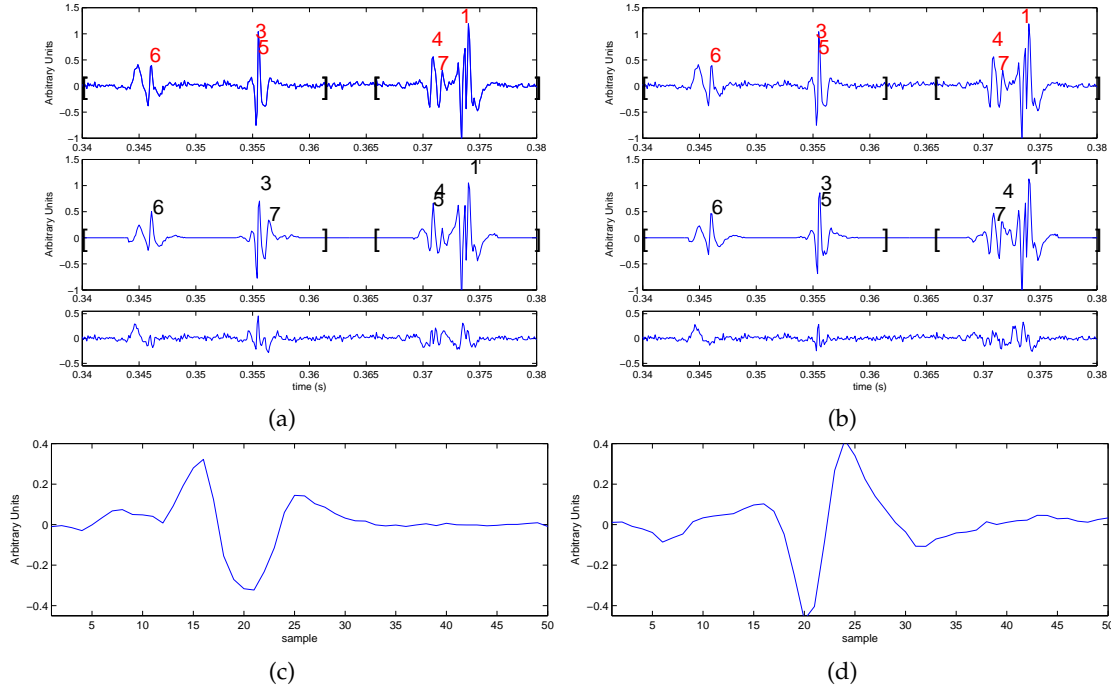


FIG. 2.8 – Comparaison des deux versions de décomposition par maximisation itérative. (a) en haut : deux segments d'un signal EMG enregistré sont affichés, chacun délimité par les crochets. Les résultats de référence sont décomposés par EMGLAB et numérotés par les labels. au milieu : la reconstruction du signal EMG par la méthode de décomposition proposée, version de recherche Tabou segment par segment. Une erreur de type « label switching » est constatée entre l'unité 5 et 7 par rapport à la référence. en bas : l'erreur de la reconstruction. (b) Les mêmes que dans (a) par application de maximisation conjointe des 2 segments. Les labels des unités motrices sont estimés sans faute dans ce cas. On observe une erreur de reconstruction moindre tout en gardant la régularité des trains d'impulsions. Dans (c) et (d) sont des formes des potentiels {#5, #7}.

unités motrices détectées en utilisant EMGLAB par un opérateur, le nombre de trains d'impulsions validés par la méthode proposée et le critère A.

On constate d'abord que plus de la moitié des segments contient des potentiels superposés. Plus de la moitié des trains d'impulsions est validée sous la condition de  $\sigma/m < 0.3$  et l'on trouve  $A > 85\%$  pour tous les signaux réels testés. Cette performance n'a jamais été atteinte dans la littérature pour une décomposition entièrement non supervisée des signaux EMG. La moyenne du critère est  $91.5 \pm 4.4\%$  et  $88.4 \pm 2.8\%$  respectivement pour les signaux EMG correspondant aux niveaux de contractions MVC 5% et 10%. Le temps de calcul requis pour la décomposition des signaux réels (de durée 10 secondes) est entre 15-30 min, selon la parcimonie des trains et le nombre d'unités détectées.

La figure 2.9 montre un exemple de décomposition d'un segment contenant 7 potentiels superposés. La méthode est donc capable de traiter les situations de superpositions sophistiquées.

Le taux de mise à feu instantanée (*instantaneous discharge rate*) pour les deux trains validés du signal EMG#5 (MVC= 10% du tableau 2.5) est tracée dans la figure 2.10(a)(b). Les formes des potentiels correspondants sont illustrées dans la figure 2.10(c)(d). Le taux de mise à feu instantanée est définie par l'inverse de l'intervalle entre impulsions successives pour chaque unité motrice :

$$f_i(x_{i,j}) = \frac{1}{x_{i,j} - x_{i,j-1}}$$

TAB. 2.4 – Comparaison des deux versions de maximisation itérative sur le signal EMG #1 du tableau 2.5

Un seg	MU#1	MU#2	MU#3	MU#4	MU#5
FP	26	117	63	112	115
FN	22	65	34	42	66
TD	146	118	122	89	135
A(i)	67.2%	\	21.5%	\	\
$\sigma/m$	0.252	0.352	0.354	0.400	0.334
Val	1	0	0	0	0
A	67.2%				
Deux seg	MU#1	MU#2	MU#3	MU#4	MU#5
FP	4	5	9	22	39
FN	11	6	6	12	6
TD	146	118	122	89	135
A(i)	89.7%	90.7%	87.7%	61.8%	66.7%
$\sigma/m$	0.256	0.224	0.215	0.303	0.311
Val	1	1	1	0	0
A	89.4%				

TAB. 2.5 – Résultats de la décomposition sur les signaux EMG de MVC= 5% et 10% par maximisation conjointe. %SS indique le pourcentage des segments où les potentiels sont superposés.

	MVC = 5%				
	EMG#1	EMG#2	EMG#3	EMG#4	EMG#5
%SS	44.1%	63.3%	52.2%	50.1%	55.4%
# UM - EMGLAB	4	7	5	5	4
# Val	3	4	2	5	3
A	96.4%	87.7%	96.2%	88.7%	88.6%
	MVC = 10%				
	EMG#1	EMG#2	EMG#3	EMG#4	EMG#5
%SS	55.5%	52.7%	54.9%	54.1%	50.1%
# UM - EMGLAB	5	5	8	8	4
# Val	3	4	4	4	2
A	89.4%	85.1%	87.7%	87.2%	92.5%

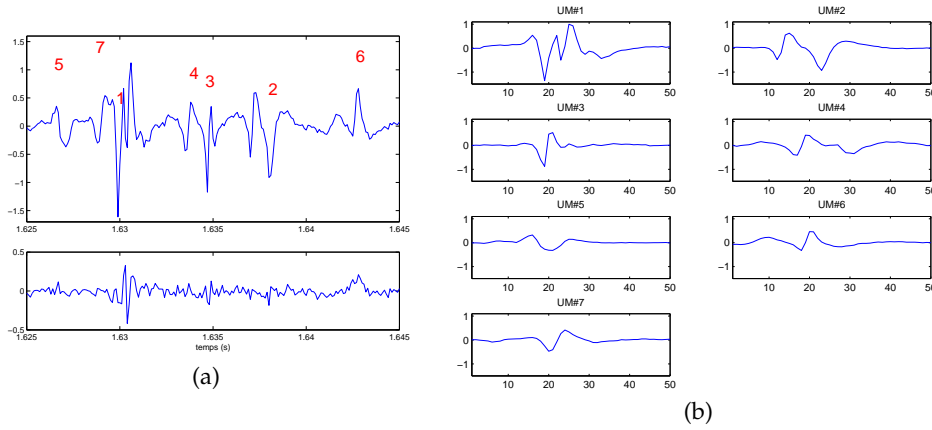


FIG. 2.9 – (a) En haut : un segment du signal EMG et les labels des impulsions par la méthode de maximisation conjointe. En bas : l'erreur de reconstruction. (b) Les formes des potentiels estimés.

Les statistiques des faux positifs et des faux négatifs sont également données dans la figure 2.10, sachant qu'un faux positif induit localement une fréquence instantanée très élevée alors qu'un faux négatif donne une fréquence instantanée très faible. Cette information fournit une interprétation de la qualité de décomposition pour les neurologues, et permet donc de valider visuellement la méthode proposée de décomposition sur des données expérimentales.

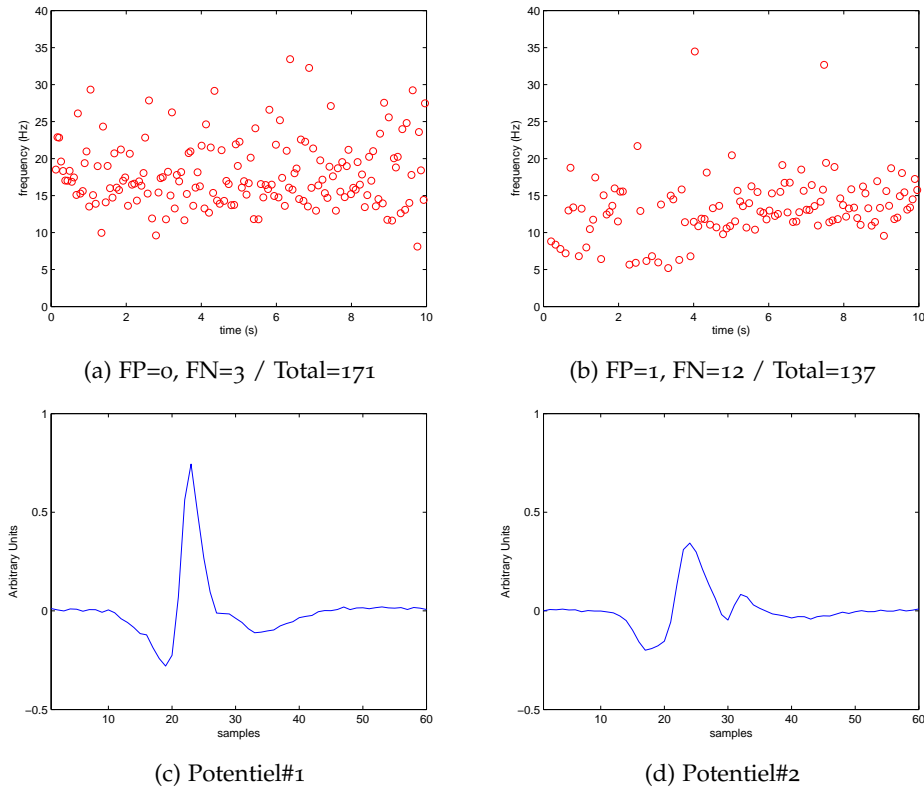


FIG. 2.10 – (a),(b) La fréquence instantanée obtenue par les résultats de la décomposition du signal EMG#5 (MVC= 10% du tableau 2.5). (c),(d) Les formes des potentiels correspondants.

## 2.4 CONCLUSION

Nous avons proposé une méthode de décomposition complètement non-supervisée de signaux EMG intramusculaires mono-canal. Cette méthode ne nécessite aucune interaction manuelle. La précision atteint approximativement 90%, comparée aux résultats obtenus par la méthode de référence supervisée, dans le cas de niveau de contraction allant jusqu'à MVC= 10% et d'au plus 8 unités motrices présentes.

L'estimateur MAP proposé est un moyen efficace et non-supervisé pour traiter le problème de la décomposition de signal EMG composé de multiples unités motrices. Le modèle statistique bayésien sur la génération des données de signal EMG a permis l'inclusion des informations *a priori* disponibles, comme la distribution d'allure gaussienne de l'ISI et la période réfractaire des fibres musculaires. La propriété de régularité des trains d'impulsions qui guide les opérateurs dans les méthodes de décomposition manuelles McGill [Jul 2002], McGill et al. [Dec 2005], Lewicki [1998], est ici intégrée dans le modèle bayésien via la loi *a priori* sur  $(1_{x_i})_i$ . La maximisation de la probabilité *a posteriori* s'effectue itérativement par rapport aux paramètres continus et discrets. L'optimisation discrète constitue un problème NP-complet sur un espace combinatoire. En outre, une extension par maximisation conjointe sur deux segments adjacents a été introduite pour adresser le problème de convergence vers des optima locaux.

Le modèle choisi fait l'hypothèse d'indépendance mutuelle entre les trains d'impulsions, et ce bien que ce ne soit pas complètement réaliste du point de vue physiologique. Cependant, les signaux réels traités viennent d'un muscle présentant un fort degré de synchronisation entre unités motrices [Farina et al. 2008]. La méthode proposée semble avoir donné des résultats satisfaisants comparés à des décompositions effectuées par des experts, malgré cette hypothèse non réaliste, mais qui facilite l'implémentation.

Le réglage des paramètres de l'algorithme Tabou reste un problème ouvert. Comment fixer la taille de la mémoire FIFO et le nombre d'itérations  $M$  pour chaque recherche Tabou (empiriquement fixé à 20 jusqu'ici)? On introduira au chapitre 4 une approche de décomposition par MCMC qui ne nécessite pas de pareils réglages. Le cadre de la simulation stochastique est une autre façon d'explorer le domaine combinatoire des trains d'impulsions. Auparavant, on développera dans le chapitre 3 les techniques de base pour la déconvolution aveugle d'un processus Bernoulli-gaussien, soit un problème proche de celui de ce travail, mais plus étudié dans la littérature. Les résultats qui y sont développés seront ensuite adaptés à notre problème dans le chapitre 4.



# DÉCONVOLUTION D'UN PROCESSUS IMPULSIONNEL

# 3

## 3.1 INTRODUCTION

L'inconvénient majeur de la méthode d'optimisation présentée au chapitre précédent est l'utilisation d'une approche heuristique dont aucune propriété de convergence n'est démontrée, et qui nécessite une certaine expertise pour le réglage de paramètres tels que le nombre d'itérations pour la recherche de Tabou et la taille de la liste de Tabou, alors que l'objectif de ce travail est une décomposition complètement automatique d'un signal EMG.

D'autre part, les formes des potentiels issus de la même unité motrice subissent des modifications d'échelle progressives en cours d'enregistrement. Ceci est dû soit aux changements des propriétés des unités motrices, soit au déplacement des électrodes vis-à-vis des fibres musculaires. Ce phénomène est appelé « intra-MU shape variability » [Farina et al. 2001]. Afin de relaxer l'hypothèse sur l'amplitude constante des trains d'impulsions, on envisage une modélisation plus souple en laissant une variabilité sur les amplitudes, *e.g.*, celles-ci suivent la loi gaussienne  $\mathcal{N}(1, \sigma_0^2)$  de moyenne fixe 1 et de variance  $\sigma_0^2$  inconnue. Le problème se ramène donc à la restauration des trains impulsifs d'amplitudes gaussiennes et des réponses impulsionnelles (RI) associées à chaque unité motrice (les formes de potentiels) à partir d'une observation de mélange de ces produits convolutifs.

Bien qu'on pourrait essayer de traiter ce problème plus général dans le cadre du chapitre précédent, on y reconnaît un problème voisin, la déconvolution de processus Bernoulli-Gaussien (BG), largement traité dans la littérature, comme par exemple dans Kormylo et Mendel [1983], et souvent abordé par les techniques de simulation stochastique de type MCMC [Cheng et al. 1996, Champagnat et al. 1996]. Dans le présent chapitre, on étudie diverses techniques de déconvolution BG (mono-source mono-capteur) utilisant une approche MCMC. Les techniques d'échantillonnage MCMC pour un couple de variables BG  $(q_i, x_i)$  seront adaptées dans le chapitre 4, consacré à l'application à la décomposition de signaux EMG.

Le but du présent chapitre est de proposer un algorithme regroupant un ensemble d'astuces vis-à-vis de différentes sources d'inefficacité en déconvolution BG par MCMC. Labat et Idier [2006] traitent l'ambiguïté intrinsèque au problème de déconvolution aveugle : celle du décalage temporel pour le produit de convolution, soit  $x(t) * h(t) = x(t + \tau) * h(t - \tau)$ . Une étape de Metropolis-Hastings est introduite dans l'algorithme : une version décalée du couple (séquence BG  $x$  et sa réponse impulsionnelle  $h$ ) est d'abord proposée avec une certaine probabilité fixe et sera ensuite acceptée avec une probabilité évaluée selon l'algorithme de Metropolis-Hastings. La condition de réversibilité est garantie et l'on constate que la chaîne de Markov explore

plus efficacement l'espace des solutions temporellement décalées  $\{x(t + \tau), h(t - \tau)\}_\tau$ . Veit et al. [2009] ont proposé d'étudier l'inefficacité liée à l'ambiguïté d'échelle : soit pour un produit de convolution  $x(t) * h(t) = s \cdot x(t) * \frac{1}{s} \cdot h(t)$ . Sans augmentation significative du coût de calcul, une étape supplémentaire d'échantillonnage de l'échelle  $s$ , mathématiquement rigoureuse, est introduite ; cette étape permet d'améliorer la performance de l'algorithme MCMC, en explorant plus efficacement l'espace des solutions  $\{s \cdot x(t), \frac{1}{s} \cdot h(t)\}_s$ .

Les deux méthodes se montrent plus efficaces que l'échantillonneur de Gibbs de Cheng et al. [1996], pionnier dans l'application des MCMC à la déconvolution BG aveugle. Dans le même esprit, on a contribué à améliorer l'efficacité d'échantillonnage vis-à-vis de la séquence de Bernoulli [Ge et al. 2008]. On montre d'abord que l'échantillonneur Gibbs de [Cheng et al. 1996] explore inefficacement l'espace combinatoire de la séquence de Bernoulli : il s'enlise longuement dans des configurations particulières, souvent correspondant aux optima locaux de la loi *a posteriori*. Ce constat rejoint celui de Bourguignon et Carfantan [2005] : la chaîne de Markov s'équilibre rapidement autour d'un mode (optimal local), mais prend beaucoup de temps à passer d'un mode à l'autre.

Ce chapitre est organisé comme suit : après une brève formulation du problème de déconvolution aveugle avec source Bernoulli-gaussienne, l'échantillonneur de Gibbs de [Cheng et al. 1996] est présenté sous forme de tableau algorithmique, puis les deux contributions liées aux ambiguïtés temporelles et d'échelle sont introduites dans la section 3.3. L'ensemble obtenu est considéré comme une méthode de référence.

Mais on expose dans la suite une autre source d'inefficacité pour laquelle un exemple illustratif est donné dans la section 3.6 : la séquence BG n'évolue que très lentement même en tenant compte des améliorations introduites. On présente une première solution dans la section 3.7, qui consiste en un échantillonneur de Gibbs (appelé échantillonneur *K*-tuple) traitant des blocs de variables Bernoulli. L'amélioration du comportement de la chaîne est illustrée sur un exemple de simulation. La section 3.8 donne une deuxième solution : l'échantillonneur partiellement marginalisé. Le même exemple de simulation est testé pour évaluer sa capacité à se sortir de configurations particulières. Les techniques d'optimisation de l'implémentation numérique sont également détaillées pour les deux méthodes proposées. La section 3.9 est dédiée aux tests complets en simulation après introduction du diagnostic de convergence selon Brooks et Gelman [1998]. On conclura par une discussion sur les avantages et inconvénients des deux nouvelles méthodes proposées.

## 3.2 FORMULATION DU PROBLÈME

Le problème de la restauration d'une séquence parcimonieuse convoluée par un système linéaire et entaché d'un bruit se pose dans de nombreux domaines tels que l'exploration sismique [Cheng et al. 1996, Kormylo et Mendel 1983] et l'astronomie [Bourguignon et Carfantan 2005]. Le modèle mathématique s'écrit, pour tout  $n \in \{1, \dots, N\}$

$$z_n = \sum_{k=0}^P h_k x_{n-k} + \epsilon_n, \quad (3.1)$$

où  $z = [z_1, \dots, z_N]^t$  désigne le vecteur observé,  $h = [h_0, \dots, h_P]^t$  la réponse impulsionnelle (RI) du système linéaire (supposée finie ici) et  $\epsilon = [\epsilon_1, \dots, \epsilon_N]^t$  un bruit gaussien i.i.d. Par souci de simplicité, la condition de bord « nulle » est imposée sur la séquence

parcimonieuse  $\mathbf{x}$  à restaurer, soit  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_M]^t$  avec  $M = N - P$  et la séquence  $\mathbf{x}$  est supposée nulle en dehors des  $M$  instants. Le problème de déconvolution est dit « aveugle » lorsque  $\mathbf{h}$  n'est pas connue. Avec la condition de bord « nulle » de la convolution,  $\mathbf{z}$  peut être réécrite sous la forme d'une multiplication matricielle  $\mathbf{z} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon}$ , où  $\mathbf{H}$  désigne la matrice Toeplitz de convolution  $N \times M$ . Dans la suite, on utilise également la matrice Toeplitz  $\mathbf{X}$  de taille  $N \times (P + 1)$  telle que  $\mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{X}\mathbf{h}$ .

Dans cette étude, nous adoptons le modèle Bernoulli-gaussien (BG) pour la séquence  $\mathbf{x}$ , suivant Kormylo et Mendel [1983] et de nombreuses contributions ultérieures telles que Cheng et al. [1996], Champagnat et al. [1996]. Un processus BG i.i.d. est défini en deux étapes. Tout d'abord, la nature de la parcimonie est traduite par la loi de Bernoulli :

$$P(\mathbf{q}) = \lambda^{L(\mathbf{q})} (1 - \lambda)^{M-L(\mathbf{q})} \quad (3.2)$$

où  $\mathbf{q} = [q_1, \dots, q_M]^t$  représente la séquence de Bernoulli et on note  $L(\mathbf{q}) = \sum_{m=1}^M q_m$  le nombre d'éléments non nuls de  $\mathbf{q}$ . Les amplitudes  $\mathbf{x}$  suivent la loi multivariée gaussienne centrée conditionnellement à  $\mathbf{q}$  :

$$\mathbf{x} | \mathbf{q} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_x^2 \text{diag}(\mathbf{q})), \quad (3.3)$$

où  $\text{diag}\{\mathbf{q}\}$  désigne la matrice diagonale dont la diagonale est  $\mathbf{q}$ .

Les hypothèses statistiques sont faites de la même manière que dans [Cheng et al. 1996] :

- $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I})$  est indépendant de  $\mathbf{x}$  et de  $\mathbf{h}$ ,  $\sigma_\epsilon^2$  est un hyperparamètre inconnu ;
- $\mathbf{x}$  est un processus BG définie par Eqs.(3.2)-(3.3) avec  $\sigma_x^2 = 1$  et  $\lambda$  inconnu ;
- $\mathbf{h} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_h^2 \mathbf{I}_{P+1})$ , où  $\sigma_h^2$  est un hyperparamètre inconnu ;

**Remarque 3.1**  $\sigma_x^2$  est fixé à 1 afin de lever l'ambiguïté d'échelle du problème de déconvolution aveugle [Labat et Idier 2006]. On peut choisir de fixer arbitrairement soit  $\sigma_x^2$ , soit  $\sigma_h^2$ , l'autre variance étant probablisée par une loi a priori.

Selon le principe de Monte Carlo, un estimateur de la moyenne *a posteriori* de  $\Theta = \{\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{h}, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \sigma_h^2\}$  étant donné  $\mathbf{z}$  peut être approché par :

$$\widehat{\Theta} = \frac{1}{I - J} \sum_{k=J+1}^I \Theta^{(k)}, \quad (3.4)$$

où la somme s'étend sur les derniers  $I - J$  échantillons  $\{\Theta^{(k)}, k = J + 1, \dots, I\}$ .

L'approche MCMC [Liu 2001, Robert et Casella 2004] est un outil numérique puissant, permettant de générer une chaîne de Markov itérativement, de sorte qu'asymptotiquement  $\Theta^{(k)}$  suit en distribution la loi cible, et ce quel que soit l'état initial de la chaîne. Dans le domaine de la déconvolution aveugle BG, Cheng et al. [1996] sont les premiers à introduire cette approche. Ils ont proposé de s'appuyer sur un algorithme de Gibbs dans lequel la remise à jour scalaire est appliquée sur la séquence  $\mathbf{x}$ . Cet algorithme simple constitue un exemple canonique de l'application, pour laquelle la loi conjointe *a posteriori* [Robert et Casella 2004] s'écrit :

$$P(\Theta | \mathbf{z}) \propto g(\mathbf{z} - \mathbf{H}\mathbf{x}; \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_N) g(\mathbf{x}; \text{diag}\{\mathbf{q}\}) \\ g(\mathbf{h}; \sigma_h^2 \mathbf{I}_{P+1}) P(\mathbf{q}; \lambda) P(\sigma_h^2) P(\lambda) P(\sigma_\epsilon^2) \quad (3.5)$$

où  $g(\cdot; \mathbf{R})$  désigne la distribution gaussienne centrée de covariance  $\mathbf{R}$ . Par souci de simplicité de mise en oeuvre numérique, les lois *a priori* conjuguées sont choisies pour les trois derniers termes  $P(\sigma_h^2), P(\lambda)$  et  $P(\sigma_\epsilon^2)$  de l'équation (3.5) :

$$\sigma_h^2 \sim \text{IG}(1, 1), \quad \lambda \sim \text{Be}(1, 1), \quad \sigma_\epsilon^2 \sim \text{IG}(1, 1) \quad (3.6)$$



où  $IG$  et  $Be$  représentent la loi inverse Gamma et la loi Beta respectivement. L'allure suffisamment plate de  $IG(1,1)$  ne privilégie aucune valeur particulière de  $\sigma_\epsilon^2$  et  $\sigma_h^2$ , tandis que  $Be(1,1)$  est la distribution uniforme dans l'intervalle  $[0,1]$ .

### 3.3 ÉCHANTILLONNEUR DE GIBBS

Un échantillonneur de Gibbs consiste à contourner les difficultés de l'inférence directe de la distribution conjointe, souvent très sophistiquée comme dans le cas de l'équation (3.5). Dans l'algorithme de Gibbs, chaque paramètre dans  $\Theta$  est échantillonné tour à tour selon sa loi conditionnelle en gardant les autres fixes. L'algorithme de Cheng et al. [1996] est donné dans le tableau 3.1 dont les calculs détaillés de certaines étapes clés sont montrés dans l'annexe A.3.

TAB. 3.1 – Algorithme de Cheng et al. [1996].  $\mathbf{I}_{P+1}$  désigne la matrice d'identité  $(P+1) \times (P+1)$ .  $\text{randn}(j,k)$  retourne une matrice  $j \times k$  dont chaque élément suit la gaussienne centrée i.i.d. de covariance unité.

```
% Initialisation
q ← 0; x ← 0; h ← 0.
h(round(P/2)) ← 1
Échantillonner  $\sigma_\epsilon^2 \sim IG(1,1)$  et  $\sigma_h^2 \sim IG(1,1)$ 
répéter
   $\sigma_1^2 \leftarrow \sigma_\epsilon^2 / (\sigma_\epsilon^2 + \|h\|^2)$ 
   $e \leftarrow z - \mathbf{H}x$  % On fixe  $\sigma_x^2 = 1$ 
  % ----Étape ① : échantillonner  $y_i = (q_i, x_i)$  ----
  pour  $i = 1$  à  $M$  faire
     $e_i \leftarrow e + h_i x_i$  %  $h_i$  désigne la  $i$ -ième colonne de  $\mathbf{H}$ .
     $\mu_i \leftarrow (\sigma_1^2 / \sigma_\epsilon^2) h_i^t e_i$ ;
     $\tilde{\lambda}_i \leftarrow \lambda \sigma_1 \exp(\mu_i^2 / (2\sigma_1^2))$ ;
     $\lambda_i \leftarrow \tilde{\lambda}_i / (\tilde{\lambda}_i + 1 - \lambda)$ 
    Échantillonner  $q_i \sim \text{Bi}(\lambda_i)$ , % Loi de Bernoulli
    Échantillonner  $x_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_1^2)$  si  $q_i = 1$ ,  $x_i = 0$  sinon.
     $e \leftarrow e_i - h_i x_i$ . % MAJ de  $e$ 
  fin pour
  % ----Étape ② : échantillonner  $h$ -----
  %  $(h | \Theta \setminus h, z) \sim \mathcal{N}(m, \mathbf{R})$  où  $\mathbf{R} = (\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{X}^t \mathbf{X} + \sigma_h^{-2} \mathbf{I}_{P+1})^{-1}$ ,  $m = \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{R} \mathbf{X}^t z$ 
   $\mathbf{S} \leftarrow \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{X}^t \mathbf{X} + \sigma_h^{-2} \mathbf{I}_{P+1}$  %  $= \mathbf{R}^{-1}$ 
   $\mathbf{U} \leftarrow \text{chol}(\mathbf{S})$  % Facteur Cholesky de  $\mathbf{R}^{-1}$  ( $\mathbf{U}^t \mathbf{U} = \mathbf{R}^{-1}$ )
   $h \leftarrow \mathbf{U}^{-1} (\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{U}^{-t} \mathbf{X}^t z + \text{randn}(P+1, 1))$ 
  % ----Étape ③ : échantillonner  $\sigma_\epsilon^2$  --
  Échantillonner  $\sigma_\epsilon^2 \sim IG(N/2 + 1, \|z - \mathbf{H}x\|^2 / 2 + 1)$ ;
  % ----Étape ④ : échantillonner  $\lambda$  -----
  Échantillonner  $\lambda \sim \text{Be}(1 + L, 1 + M - L)$ , où  $L = \sum_m q_m$ ;
  % ----Étape ⑤ : échantillonner  $\sigma_h^2$  -----
  Échantillonner  $\sigma_h^2 \sim IG(P/2 + 1, \|h\|^2 / 2 + 1)$ ;
jusqu'à Convergence % Fin de boucle
```

Les cinq étapes numérotées du tableau 3.1 sont itérées jusqu'à la convergence vers la distribution *a posteriori* de l'équation (3.5). Pour les paramètres continus dans  $\Theta$ , c'est-à-dire  $\{h, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \sigma_h^2\}$ , l'estimateur MMSE marginal est construit par moyennage

selon l'équation (3.4). Pour chaque paramètre binaire  $q_i$ , l'estimateur du maximum a posteriori marginal est adopté et correspond au vote majoritaire sur les échantillons de chaque  $q_i$ . Les amplitudes  $x$  sont estimées par MMSE conditionnellement à  $\mathbf{q}$ .

On pose  $\mathbf{y} = (\mathbf{q}, \mathbf{x})$ , et l'étape ① a pour effet d'échantillonner selon la loi conditionnelle  $P(y_i | \Theta \setminus y_i, \mathbf{z})$  pour  $i = 1, \dots, M$ . En effet, les deux sous-étapes de ① (voir Tableau 3.1) consistent à échantillonner d'abord selon  $P(q_i | \Theta \setminus (q_i, x_i), \mathbf{z})$ , puis selon  $P(x_i | \Theta \setminus x_i, \mathbf{z})$ . Une variante de l'algorithme 3.1 est d'échantillonner non pas séquentiellement le couple  $y_i$  pour  $i$  allant de 1 jusqu'à  $M$ , mais dans un ordre d'indices  $i$  obtenu par une permutation aléatoire. Or, dans les discussions suivantes, cette astuce ne permet pas d'améliorer le comportement de l'échantillonneur de Gibbs standard.

### 3.4 RÉÉCHANTILLONNAGE DU DÉCALAGE TEMPOREL

L'algorithme de Cheng et al. [1996] est simple, mais présente plusieurs inconvénients. A cause de l'ambiguïté temporelle du modèle direct (équation (3.1)), l'échantillonneur pourrait conduire à un estimateur peu fiable, surtout quand  $\mathbf{h}$  est mal initialisé (voir le résultat de simulation dans la figure 3.1(a)). La solution proposée par Cheng et al. [1996], qui consiste à fixer arbitrairement  $\arg \max_i h_i$ , n'est pas satisfaisante théoriquement, car la convergence vers la loi invariante n'est plus garantie. D'autre part, la simulation montre que cette technique triviale manque de robustesse quand la valeur de  $\arg \max_i h_i$  s'éloigne de la valeur réelle. Labat et Idier [2006] ont proposé un échantillonneur hybride dont la structure est donnée dans le tableau 3.2. En plus des cinq étapes de l'algorithme de Cheng et al. [1996], une étape de Metropolis-Hastings (entre ① et ②) permet d'explorer plus efficacement un espace constitué des couples décalés  $(\mathbf{y}(n + n_0), \mathbf{h}(n - n_0))$  pour tout entier  $n_0$ . Il convient de noter que la complexité de cette étape supplémentaire est de l'ordre de  $\mathcal{O}(P^2)$  ( $P + 1$  étant la longueur de  $\mathbf{h}$ ),  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{R}'$  étant des matrices Toeplitz.

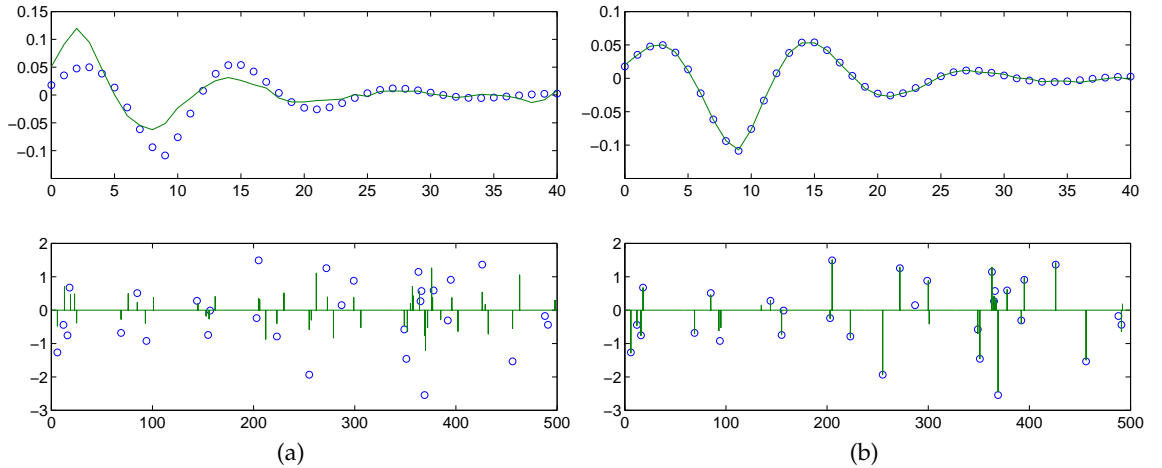


FIG. 3.1 – Comparaison des résultats obtenus par l'échantillonneur de Labat et Idier [2006] en (b) par rapport à ceux de Cheng et al. [1996] en (a). Les données simulées sont les cercles, tandis que les estimateurs de  $\mathbf{h}$  et  $\mathbf{x}$  sont tracés en trait plein.

L'exemple de la figure 3.1 montre que l'étape de Metropolis-Hastings rend l'algorithme MCMC plus robuste vis-à-vis de l'initialisation de  $\mathbf{h}$ . Dans l'exemple, la RI est

TAB. 3.2 – Étape supplémentaire de Metropolis-Hastings par Labat et Idier [2006].  $\text{Circ}(\cdot)$  désigne l'opérateur de décalage circulaire vers la droite

```

% Initialisation détaillée dans Tab. 3.1
répéter
% ---- Étape ① détaillée dans Tab. 3.1 -----
% Étape ② Metropolis-Hastings par Labat et Idier [2006]
Proposer  $\mathbf{y} \mapsto \mathbf{y}'$  avec la probabilité suivante (pour  $0 < \eta < 1$ ) :


$$\pi(\mathbf{q}', \mathbf{x}' | \mathbf{q}, \mathbf{x}) = \begin{cases} 1 - 2\eta & \text{si } (\mathbf{q}', \mathbf{x}') = (\mathbf{q}, \mathbf{x}), \\ \eta & \text{si } (\mathbf{q}', \mathbf{x}') = (\text{Circ}(\mathbf{q}), \text{Circ}(\mathbf{x})), \\ \eta & \text{si } (\mathbf{q}', \mathbf{x}') = (\text{Circ}^{-1}(\mathbf{q}), \text{Circ}^{-1}(\mathbf{x})), \end{cases}$$


 $\mathbf{S} \leftarrow \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{X}^t \mathbf{X} + \sigma_h^{-2} \mathbf{I}_{P+1}$  %  $= \mathbf{R}^{-1}$ 
 $\mathbf{S}' \leftarrow \sigma_\epsilon^{-2} (\mathbf{X}')^t \mathbf{X}' + \sigma_h^{-2} \mathbf{I}_{P+1}$  %  $= (\mathbf{R}')^{-1}$ 
 $\mathbf{U} \leftarrow \text{chol}(\mathbf{S})$ 
 $\mathbf{U}' \leftarrow \text{chol}(\mathbf{S}')$ 
 $\rho \leftarrow \sigma_\epsilon^{-4} |(\mathbf{U}')^{-t} (\mathbf{X}')^t \mathbf{z}|^2 - \sigma_\epsilon^{-4} |\mathbf{U}^{-t} \mathbf{X}^t \mathbf{z}|^2 + 2 \log |\mathbf{U}| / |\mathbf{U}'|$ 
%  $\rho = (\mathbf{m}')^t (\mathbf{R}')^{-1} \mathbf{m}' - \mathbf{m}^t \mathbf{R}^{-1} \mathbf{m} + \log |\mathbf{R}'| / |\mathbf{R}|$ 
si  $2 \log(\text{rand}) < \rho$  alors % avec probabilité  $\min\{1, \exp(\rho/2)\}$ 
     $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{y}'$ 
     $\mathbf{h} \leftarrow (\mathbf{U}')^{-1} (\sigma_\epsilon^{-2} (\mathbf{U}')^{-t} (\mathbf{X}')^t \mathbf{z} + \text{randn}(P+1, 1))$ 
else
     $\mathbf{h} \leftarrow \mathbf{U}^{-1} (\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{U}^{-t} \mathbf{X}^t \mathbf{z} + \text{randn}(P+1, 1))$ 
fin si
% --- Fin de l'étape Metropolis-Hastings -----
% --- Étapes ③- ⑤ dans Tab. 3.1 -----
jusqu'à Convergence

```

définie par :

$$h_i^* = \sin(\pi(i+1)/6.4) \exp(-0.12|i-9|), i = 0, \dots, 40$$

$$\mathbf{h} = \mathbf{h}^* / \sum_i |h_i^*|$$

dont l'allure est aussi tracée à l'aide de cercles dans les figures 3.1(a) et (b). La séquence de BG  $\mathbf{x}$  est générée selon l'équation (3.2)- (3.3) avec  $\lambda = 0.06$  et  $\sigma_x^2 = 1$ . L'observation  $\mathbf{z}$  est obtenue pour  $M = 500$  et bruitée par un gaussien de variance  $\sigma_\epsilon = 0.007$ , ce qui correspond à un RSB de 18.13dB. Les mêmes initialisations des paramètres ont été adoptées par les deux méthodes, notamment en fixant  $\mathbf{q}^{(0)} = \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$  et  $\mathbf{h}^{(0)} = \overline{|\mathbf{z}|} \delta(i-6)$  alors que  $\arg \max_i |\mathbf{h}_i| = 9$  (cf. la figure 3.1(a) et (b)), soit un décalage de 3 pas de temps. 2000 échantillons sont générés pour les deux méthodes, les 1000 derniers sont utilisés pour construire les estimateurs.

### 3.5 RÉÉCHANTILLONNAGE DE L'ÉCHELLE

Parallèlement à l'ambiguïté temporelle, Veit et al. [2009] ont constaté que l'échelle du couple  $(\mathbf{x}, \mathbf{h})$  ne varie que très lentement dans la chaîne : les réalisations successives sont fortement corrélées et la convergence est très lente vers la distribution cible. En pratique, on fixe la norme de  $\mathbf{h}$  ou de  $\mathbf{x}$  en cours d'échantillonnage, ce qui revient à lever doublement l'ambiguïté d'échelle car la loi *a posteriori* sur  $\Theta$  (3.5) impose déjà

$\sigma_x^2 = 1$  en laissant inconnu le paramètre  $\sigma_h^2$ . L'idée de Veit et al. [2009] est d'introduire une étape supplémentaire de rééchantillonnage de l'échelle dans l'algorithme de Gibbs de la façon suivante :

$$\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} \times s, \quad \mathbf{h}^+ = \mathbf{h}/s \quad (3.7)$$

où  $s$  désigne le paramètre d'échelle, qui sera lui même rééchantillonné selon sa loi conditionnelle à chaque itération.

Pour rester mathématiquement rigoureux, un changement de variable  $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{h})$  est d'abord défini par :

$$(s, \mathbf{v}) = \phi(\mathbf{x}, \mathbf{h}) = (\underbrace{x_1/x_1^{\text{old}}}_s, \underbrace{x_2/x_1, \dots, x_M/x_1, x_1 h_0, \dots, x_1 h_P}_v), \quad (3.8)$$

où la quantité  $x_1^{\text{old}}$  est la première composante de  $\mathbf{x}$ , soit  $x_1$  si celle-ci est non nulle, ce qu'on suppose pour l'instant.

On remarque que  $\mathbf{v}$  est un vecteur de taille  $M + P$  pour  $\dim(\mathbf{x}) = M$  et  $\dim(\mathbf{h}) = P + 1$ . Quelle que soit la valeur de  $s$ ,

$$\mathbf{x} * \mathbf{h} = \mathbf{x}^+ * \mathbf{h}^+ = [1, v_1, \dots, v_{M-1}] * [v_M, \dots, v_{M+P}]$$

est toujours vrai. En d'autres termes, la vraisemblance du modèle reste inchangée vis-à-vis de  $s$  telle que

$$P(\mathbf{z} | s, \mathbf{v}, \sigma_\epsilon^2) = P(\mathbf{z} | \mathbf{v}, \sigma_\epsilon^2).$$

Ce changement de paramètre permet d'exprimer explicitement la variable d'échelle  $s$ , que l'on va ensuite échantillonner directement suivant sa loi conditionnelle, qui s'écrit alors :

$$\begin{aligned} P(s | \Theta \setminus s, \mathbf{z}) &\propto P(\mathbf{z} | s, \mathbf{v}, \sigma_\epsilon^2) P_{S, \mathbf{V}}(s, \mathbf{v}) \\ &\propto \left| \frac{\partial \phi^{-1}}{\partial s} \right| P_{\mathbf{X}, \mathbf{H}}(\phi^{-1}(s, \mathbf{v})) \\ &\propto |s|^{M-P-2} P_{\mathbf{X}}(s\mathbf{x} | \mathbf{q}) P_{\mathbf{H}}(\mathbf{h}/s | \sigma_h^2) \\ &\propto |s|^{M-P-2} \exp \left\{ - \sum_{j, q_j=1} \frac{s^2 x_j^2}{2} \right\} \prod_{j, q_j=0} P(sx_j | q_j) \exp \left\{ - \frac{|\mathbf{h}|^2}{2s^2 \sigma_h^2} \right\} \\ &\propto |s|^{\sum q_i - P - 2} \exp \left\{ - \frac{s^2 |\mathbf{x}|^2}{2} \right\} \exp \left\{ - \frac{|\mathbf{h}|^2}{2s^2 \sigma_h^2} \right\} \end{aligned} \quad (3.9)$$

La dernière proportion est due au fait que la probabilité conditionnelle de  $(x_j | q_j = 0)$  s'écrit

$$P(x_j | q_j = 0) = \lim_{\sigma_0^2 \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} \exp \left\{ - \frac{x_j^2}{2\sigma_0^2} \right\}.$$

Par un changement de variable  $\bar{\sigma} = \sigma_0/s$ , on montre que :

$$\begin{aligned} P(sx_j | q_j = 0) &= \lim_{\sigma_0^2 \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} \exp \left\{ - \frac{s^2 x_j^2}{2\sigma_0^2} \right\} = \lim_{\sigma_0^2 \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2 \bar{\sigma}^2}} \exp \left\{ - \frac{s^2 x_j^2}{2s^2 \bar{\sigma}^2} \right\} \\ &= \frac{1}{|s|} \lim_{\sigma_0^2 \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{\sigma}^2}} \exp \left\{ - \frac{x_j^2}{2\bar{\sigma}^2} \right\} = \frac{1}{|s|} \lim_{\bar{\sigma}^2 \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{\sigma}^2}} \exp \left\{ - \frac{x_j^2}{2\bar{\sigma}^2} \right\} \\ &= \frac{1}{|s|} P(x_j | q_j = 0) \end{aligned}$$

En appliquant un changement de variable  $y = s^2$  sur l'équation (3.9), on en déduit que  $s^2$  suit la loi *Inverse Gaussienne Généralisée* (GIG) dont la densité s'exprime :

$$f_{\text{GIG}}(y) = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{\lambda/2} \frac{y^{\lambda-1}}{2K_{\lambda}(\sqrt{\alpha\beta})} \exp\left(-\frac{1}{2}(\beta y^{-1} + \alpha y)\right) \quad (3.10)$$

où  $K_{\lambda}(\cdot)$  désigne la fonction de Bessel de 3-ième espèce et les paramètres sont

$$\lambda = \frac{1}{2}(\sum q_i - P - 1), \quad \alpha = |\mathbf{x}^{\text{old}}|^2, \quad \beta = |\mathbf{h}^{\text{old}}|^2 / \sigma_{\mathbf{h}}^2. \quad (3.11)$$

Cette étape de rééchantillonnage d'échelle est résumée dans le tableau 3.3. On remarque que l'hypothèse que  $x_1^{\text{old}} \neq 0$  n'est pas limitative, car le changement de variable est effectué de la même façon pour échantillonner  $s$  suivant la même loi GIG s'il existe un autre élément non nul dans  $(\mathbf{x}, \mathbf{h})$ . Dans le cas contraire, c'est-à-dire  $(\mathbf{x}, \mathbf{h}) = \mathbf{0}$ , l'échelle  $s$  n'aura plus de sens, il sera donc inutile de rééchantillonner l'échelle  $s$ .

TAB. 3.3 – Algorithme du rééchantillonnage d'échelle.

```
% Initialisation détaillée dans Tab. 3.1
répéter
% -Étape ① détaillée dans Tab. 3.1 -----
% Étape Metropolis-Hastings par Labat et Idier [2006]
% Étape du rééchantillonnage d'échelle par Veit et al. [2009]
 $\lambda \leftarrow (\sum q_i - P - 1)/2$ 
 $\alpha \leftarrow |\mathbf{x}|^2, \quad \beta \leftarrow |\mathbf{h}|^2 / \sigma_{\mathbf{h}}^2$ 
 $s^2 \sim f_{\text{GIG}}(s^2; \lambda, \alpha, \beta)$  % GIG simulée par acceptation-rejet
 $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} \cdot s, \quad \mathbf{h} \leftarrow \mathbf{h} / s$ 
% --Fin du rééchantillonnage d'échelle -----
% --- Étapes ③- ⑤ dans Tab. 3.1 -----
jusqu'à Convergence
```

On fournit dans la suite une autre justification du rééchantillonnage d'échelle en se plaçant dans le cadre de l'algorithme de Gibbs *généralisé* [Liu 2001, Théorème 8.3.1], suivie d'une amélioration de l'algorithme du tableau 3.3 permettant d'explorer plus efficacement la variable d'échelle  $s$  vis-à-vis de  $\sigma_{\mathbf{h}}^2$  tout en gardant l'invariance de la loi cible.

### 3.5.1 Interprétation par algorithme de Gibbs généralisé

La notion d'algorithme de Gibbs *généralisé* a d'abord été introduite dans l'étude de l'expansion de paramètres [Liu et Wu 1999], puis développée et formalisée dans [Liu et Sabatti 1999]. La problématique est la suivante : soit  $\mathbf{w} \in \mathbf{W}$  une variable aléatoire qui suit la loi d'intérêt  $\pi$ , et  $\Gamma$  un groupe de transformations de  $\mathbf{W}$  dans  $\mathbf{W}$ . Comment échantillonner  $\gamma \in \Gamma$ , pour que  $\gamma(\mathbf{w})$  suive la même loi  $\pi$ ? Dans la formalisation de Liu et Sabatti [1999], on montre que la transformation  $\gamma$  proposée est systématiquement acceptée, d'où le nom d'algorithme de « Gibbs généralisé ».

Il s'agit en particulier, dans un échantillonneur portant sur  $\mathbf{w}$ , de compléter par un échantillonnage portant sur une transformation  $\gamma \in \Gamma$ , de façon à se déplacer de  $\mathbf{w}$  à  $\gamma(\mathbf{w})$ , soit un état « plus intelligent ». L'échantillonnage de  $\gamma$  est formulé de façon à garantir l'invariance de la loi d'intérêt  $\pi$ .

Sont rappelées dans l'annexe A.4 les deux notions mathématiques concernant *groupe localement compact* et *mesure de Haar* associée. Le théorème de [Liu et Sabatti

1999] est une extension du résultat de Liu et Wu [1999], et donne le fondement mathématique pour l'algorithme de Gibbs généralisé :

**Théorème 3.1** Soit  $\Gamma$  un groupe de transformations localement compact sur  $\mathbf{W}$ , et  $H(d\gamma)$  une mesure de Haar à gauche. Soit  $\pi(\mathbf{w})$  la probabilité (loi d'intérêt) de  $\mathbf{w} \in \mathbf{W}$ . Si  $\mathbf{w} \sim \pi(\mathbf{w})$ , et si on tire  $\gamma$  suivant la loi :

$$P(\gamma | \mathbf{w}) \propto \pi(\gamma(\mathbf{w})) |J_\gamma(\mathbf{w})| H(d\gamma) \quad (3.12)$$

où  $J_\gamma(\mathbf{w}) = |\partial\gamma(\mathbf{w})/\partial\mathbf{w}|$  désigne le Jacobien de la transformation, alors  $\mathbf{w}' = \gamma(\mathbf{w})$  suit également la loi  $\pi$ .

Le théorème est montré par l'égalité  $E_{\gamma, \mathbf{w}}[h(\gamma(\mathbf{w}))] = E_\pi[h(\mathbf{w})]$ , pour toute fonction  $h$  intégrable [Liu et Wu 1999]. On résume dans le tableau 3.4 l'algorithme de Gibbs généralisé pour tout groupe de transformations localement compact  $\Gamma$ . Intuitivement, cet algorithme formalise un mouvement de type Gibbs par transformation de l'état actuel  $\mathbf{w}$  vers  $\gamma(\mathbf{w})$  de manière déterministe après avoir échantillonné  $\gamma$ . La loi d'intérêt  $\pi(\mathbf{w})$  est garantie invariante si  $\gamma$  est échantillonné selon l'équation (3.12). Le fait que  $\Gamma = \{\gamma\}$  est un groupe localement compact permet de lui associer la mesure de Haar  $H(d\gamma)$  (comme une loi *a priori*), induisant toujours une loi *a posteriori* propre [Liu et Wu 1999].

TAB. 3.4 – Une étape de l'algorithme de Gibbs généralisé [Liu et Wu 1999]

- a) Échantillonner  $\gamma \in \Gamma$  suivant  $P(\gamma | \mathbf{w}) \propto \pi(\gamma(\mathbf{w})) |J_\gamma(\mathbf{w})| H(d\gamma)$  ;
- b)  $\mathbf{w}' \leftarrow \gamma(\mathbf{w})$ .

Dans l'exemple ci-dessous, on démontre qu'un algorithme de Gibbs standard est un cas particulier de l'algorithme de Gibbs généralisé, composé d'un enchaînement d'étapes décrites dans la tableau 3.4. Soit un rééchantillonnage itératif coordonnée par coordonnée de  $\mathbf{w}$  ( $\dim(\mathbf{w}) = d$ ), à chaque itération  $1 \leq i \leq d$ , on effectue un mouvement suivant :

$$\mathbf{w} \rightarrow \mathbf{w}' = [w_1, \dots, w_{i-1}, w_i + \gamma, w_{i+1}, w_d] \quad (3.13)$$

On identifie que  $\Gamma = \{[e(\cdot), \dots, \gamma_i(\cdot), \dots, e(\cdot)]\}$ , où  $e(w_j) = w_j$  et  $w_i, w_i + \gamma \in \mathbf{W}_i = \mathbf{R}$ . La mesure de Haar se réduit à la mesure de Lebesgue pour un groupe de translations, tandis que  $|J_\gamma(\mathbf{w})| = 1$ . Selon l'algorithme 3.4, la loi conditionnelle de  $\gamma$  est  $\pi(\gamma(\mathbf{w})) = \pi(w_i + \gamma | \mathbf{w}_{-i})$ . Le mouvement de  $w_i$  vers  $w'_i = w_i + \gamma$  pour un  $\gamma$  échantillonné suivant  $\pi(\gamma(\mathbf{w}))$  est une autre interprétation de l'échantillonnage de  $w_i$  suivant sa loi conditionnelle. La chaîne est irréductible tant qu'elle est transitive par un tel enchaînement des étapes élémentaires, c'est-à-dire partant d'un état quelconque de  $\mathbf{W}$ , on est capable d'obtenir une séquence de transformations pour aller dans un autre état quelconque.

### 3.5.2 Rééchantillonnage de l'échelle plus complet

Dans le cadre de l'algorithme de Gibbs généralisé, l'algorithme de rééchantillonnage de l'échelle par Veit et al. [2009] est le résultat direct d'un groupe de transformation  $\gamma_s \in \Gamma$  :

$$(\mathbf{x}, \mathbf{h}) \xrightarrow{\gamma_s} (s\mathbf{x}, \mathbf{h}/s), \text{ pour } s \in \mathbf{R}^+ \quad (3.14)$$

On vérifie d'abord que  $\Gamma$  est un groupe abélien localement compact, pour lequel la mesure de Haar s'écrit  $H(d\gamma_s) = s^{-1}d\gamma_s$ , la même que pour le groupe d'échelle. Par ailleurs, avec  $\dim(\mathbf{x}) = M, \dim(\mathbf{h}) = P + 1$  (voir l'équation (3.1) et les conditions de bord), on obtient

$$J_{\gamma_s}(\gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h})) = s^{M-(P+1)}.$$

L'algorithme 3.4 devient alors :

- a) Échantillonner  $\gamma_s \in \Gamma$  suivant  $P(\gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h}) | \Theta \setminus (\mathbf{x}, \mathbf{h}), z) | s|^{M-P-2}$ ;
- b)  $(\mathbf{x}', \mathbf{h}') \leftarrow \gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h})$ ;

pour lequel la loi invariante s'écrit  $P(\Theta | z)$ .

D'ailleurs, on constate que

$$P(z | \gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h}), \Theta \setminus (\mathbf{x}, \mathbf{h})) = P(z | (\mathbf{x}, \mathbf{h}), \Theta \setminus (\mathbf{x}, \mathbf{h})), \forall \gamma_s \in \Gamma$$

La loi  $P(\gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h}) | \Theta, z)$  se réduit à

$$P(\gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h}) | \Theta \setminus (\mathbf{x}, \mathbf{h}), z) \propto P_{\mathbf{X}}(s\mathbf{x} | \mathbf{q}) P_{\mathbf{H}}(\mathbf{h}/s | \sigma_{\mathbf{h}}^2),$$

composée des termes de loi *a priori* sur  $(s\mathbf{x}, \mathbf{h}/s)$ . On retrouve donc exactement le même algorithme pour l'étape d'échantillonnage d'échelle que dans Veit et al. [2009] (voir l'équation (3.9)). L'intérêt de cette interprétation est d'éviter la transformation  $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{h})$  en faisant d'abord intervenir  $x_1^{\text{old}}$  et ensuite justifier la validité dans le cas  $x_1^{\text{old}} = 0$ .

Or, le terme  $P(\mathbf{h}/s | \sigma_{\mathbf{h}}^2)$  est susceptible de contraindre l'échantillonnage de  $s^2$ , sachant que la valeur de  $\sigma_{\mathbf{h}}^2$  est échantillonnée conditionnellement à  $\mathbf{h}$  (voir l'étape ⑤ du tableau 3.1). C'est un inconvénient typique d'application de l'algorithme MCMC sur un modèle hiérarchique ; idéalement, les hyperparamètres devraient être rééchantillonnés dans la même itération que les paramètres.

On propose donc d'inclure le paramètre  $\sigma_{\mathbf{h}}^2$  dans la transformation d'échelle :

$$(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \sigma_{\mathbf{h}}^2) \xrightarrow{\gamma_s} (s\mathbf{x}, \mathbf{h}/s, \sigma_{\mathbf{h}}^2/s^2), \text{ pour } s \in \mathbf{R}^+ \quad (3.15)$$

Toutes les propriétés sont vérifiées pour appliquer l'algorithme de Gibbs généralisé comme dans le cas précédent. Soit

1. le jacobien s'écrit  $J_{\gamma_s}((\mathbf{x}, \mathbf{h})) = s^{M-(P+1)-2}$ ,
2. la mesure de Haar reste  $H(d\gamma_s) = s^{-1}d\gamma_s$ ,
3.  $\gamma_s$  est échantillonné suivant  $\gamma_s \propto P(\gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \sigma_{\mathbf{h}}^2) | \Theta \setminus (\mathbf{x}, \mathbf{h}, \sigma_{\mathbf{h}}^2), z) s^{M-P-4}$ .

Développons le dernier terme et l'on obtient :

$$\begin{aligned} P(\gamma_s(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \sigma_{\mathbf{h}}^2) | \Theta \setminus (\mathbf{x}, \mathbf{h}, \sigma_{\mathbf{h}}^2), z) &\propto P_{\mathbf{X}}(s\mathbf{x} | \mathbf{q}) P_{\mathbf{H}}(\mathbf{h}/s | \sigma_{\mathbf{h}}^2/s^2) P_{\sigma_{\mathbf{h}}^2}(\sigma_{\mathbf{h}}^2/s^2) \\ &\propto \frac{1}{|s|^{M-\sum q_i}} \exp\left(-\frac{s^2|\mathbf{x}|^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{|\mathbf{h}|^2/s^2}{2\sigma_{\mathbf{h}}^2/s^2}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\mathbf{h}}^2/s^2}}\right)^{P+1} P_{\sigma_{\mathbf{h}}^2}\left(\frac{\sigma_{\mathbf{h}}^2}{s^2}\right) \\ &\propto s^{\sum q_i - M + P + 1} \exp\left(-\frac{s^2|\mathbf{x}|^2}{2}\right) s^{2(\alpha_{\mathbf{h}} + 1)} \exp\left(-\frac{\beta_{\mathbf{h}} s^2}{\sigma_{\mathbf{h}}^2}\right) \\ &\propto s^{\sum q_i - M + P + 2\alpha_{\mathbf{h}} + 3} \exp\left(-s^2\left(\frac{|\mathbf{x}|^2}{2} + \frac{\beta_{\mathbf{h}}}{\sigma_{\mathbf{h}}^2}\right)\right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

On note que la loi *a priori* de  $\sigma_{\mathbf{h}}^2$  est une loi inverse gamma  $\text{IG}(\alpha_{\mathbf{h}} = 1, \beta_{\mathbf{h}} = 1)$  dans l'application. Le terme  $P_{\mathbf{H}}(\mathbf{h}/s | \sigma_{\mathbf{h}}^2/s^2)$  n'est plus fonction de  $s$ , d'où sa disparition. Pour  $s^2$ ,

on retrouve la même famille de distribution  $f_{\text{GIG}}(s^2; \lambda, \alpha, \beta)$  que dans l'équation (3.10), avec les paramètres :

$$\lambda = \frac{1}{2} (\sum q_i + 2\alpha_h), \quad \alpha = |x|^2 + \frac{2\beta_h}{\sigma_h^2}, \quad \beta = 0.$$

C'est une astuce particulièrement intéressante lorsque le modèle BG fait intervenir

TAB. 3.5 – *Algorithme de rééchantillonnage d'échelle proposé*

```
% Initialisation détaillée dans Tab. 3.1
répéter
% -Étape ① détaillée dans Tab. 3.1 -----
% -Étape Metropolis-Hastings par Labat et Idier [2006]-
% -Étape proposée du rééchantillonnage d'échelle -
 $\lambda \leftarrow (\sum q_i + 2\alpha_h)/2$ 
 $\alpha \leftarrow |x|^2 + 2\beta_h/\sigma_h^2, \quad \beta \leftarrow 0$ 
Échantillonner  $s^2 \sim f_{\text{GIG}}(s^2; \lambda, \alpha, \beta)$ 
 $x \leftarrow x \cdot s, \quad h \leftarrow h/s, \quad \sigma_h^2 \leftarrow \sigma_h^2/s^2$ 
% -----Fin du rééchantillonnage d'échelle -----
% --- Étapes ③- ⑤ dans Tab. 3.1 -----
jusqu'à Convergence
```

une moyenne non nulle (inconnue) sur les amplitudes. On l'appelle dans la suite l'algorithme de référence.

### 3.6 ÉCHANTILLONNAGE INEFFICACE SUR $(q, x)$

Même avec les améliorations apportées par Labat et Idier [2006] et Veit et al. [2009], on montre qu'il existe une autre source d'inefficacité dans l'algorithme de référence par un exemple de simulation. Les données de simulation dans la figure 3.2 sont générées par la convolution entre une impulsion et la réponse impulsionnelle :

$$h(i) = \cos\left((i-10)\frac{\pi}{4}\right) \exp(-|0.225i - 2|^{1.5}), \quad i = 0, \dots, 20,$$

illustrée également dans la figure 3.3(b). Une initialisation particulière de  $x$  est choisie de façon à être composée de deux impulsions avoisinantes (voir figure 3.2(a)). L'échantillonneur de référence du tableau 3.5 génère une chaîne de Markov qui prend plusieurs milliers d'itérations (variable en fonction du choix de l'initialisation du générateur des nombres aléatoires) pour visiter la configuration optimale pour la première fois.

La figure 3.3 montre que l'échantillonneur de référence tend à fabriquer des estimateurs peu fiables, et ce en particulier dans des cas difficiles, comme celui de la séquence de Mendel [Kormylo et Mendel 1983].

La même RI est adoptée dans le test de la figure 3.3, et les données sont entachées par un bruit blanc gaussien avec  $\sigma_e^2 = 4 \times 10^{-6}$ , correspondant à RSB = 12.81dB. Les trois résultats d'estimation portés dans la figure 3.3 sont issus du même jeu de simulation  $z$  et  $\Theta^{(0)}$ , la seule différence étant l'initialisation du générateur de nombres aléatoires. 1000 échantillons sont générés pour chaque chaîne et les derniers 250 sont moyennés pour calculer l'estimateur. Des variations d'estimation existent d'un résultat à un autre, en particulier dans le nombre et la position des pics de  $\hat{x}$  dans la figure 3.3. En effet,



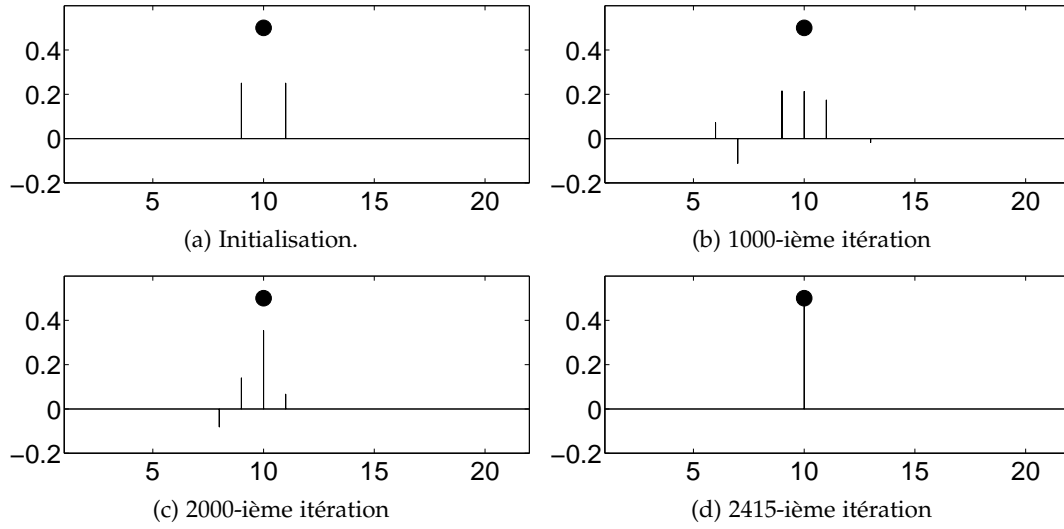


FIG. 3.2 – Séquence de BG obtenue par l'échantillonneur de référence. Partant d'une initialisation correspondant à l'optimum local, la chaîne de Markov passe plusieurs centaines d'itérations avant la première visite de la solution, c'est-à-dire un seul pic en position 10 marqué par un cercle plein.

il est possible de vérifier que chaque séquence de Bernoulli  $\{q^{(k)}\}$  tend à stagner très longtemps. Il convient de souligner que ces résultats sont typiques, c'est-à-dire qu'ils n'ont pas été choisis exprès.

Ce phénomène est essentiellement dû à l'étape ① de l'échantillonneur de référence qui explore l'espace de  $(q, x)$  de manière peu efficace. Plus précisément, les chaînes peinent à s'échapper des configurations des optima locaux de la distribution, parce que les échantillons consécutifs sont très corrélés en  $(q, x)$ .

## 3.7 ÉCHANTILLONNEUR $K$ -TUPLET

### 3.7.1 Motivation

Bourguignon et Carfantan [2005] ont relevé ce phénomène et proposé une solution en comparant les configurations par translations locales des impulsions détectées. Plutôt que d'en faire une étape MCMC, Bourguignon et Carfantan [2005] propose d'accepter systématiquement une configuration par translation d'impulsion si celle-ci est « meilleure » que la configuration initiale au sens de la distribution *a posteriori*. Théoriquement, cette technique déterministe ne peut être appliquée que pendant la période de « préchauffe » (la période avant la convergence en distribution) de la chaîne de Markov, parce qu'une telle chaîne ne vérifie pas la condition d'équilibre.

Par contre, l'algorithme de Gibbs par bloc décrit dans le tableau 3.6 la vérifie et garantit mathématiquement la convergence vers la distribution invariante. La translation locale d'impulsion y est naturellement intégrée. L'étape ①(a) permet notamment de réaliser la translation d'impulsion dans un bloc de  $K$  variables ( $K$ -tuplet noté  $q_{i+\Omega}$ ) : par exemple on peut passer d'une configuration de  $[0 \ 1]$  à  $[1 \ 0]$  dans une itération pour le cas  $K = 2$ .

Soit  $\Omega = \{0, \dots, K-1\}$  et  $i + \Omega = \{i + m \mid m \in \Omega\} = \{i, \dots, i + K - 1\}$ . Dans les notations qui suivent, les indices tels que  $i + \Omega$  (et  $-(i + \Omega)$ ) désignent un bloc de paramètre connexe ( $K$ -tuplet) dont l'indice de chaque élément appartient à  $i + \Omega$  (et son complément respectivement, c'est-à-dire  $\{1, \dots, i-1, i+K, \dots, m\}$ ). Pour tout vecteur colonne  $v$ ,  $v_{i+\Omega}$  est le vecteur tronqué  $[v_i, \dots, v_{i+K-1}]$ . Pour toute matrice  $V$ ,  $V_{i+\Omega}$

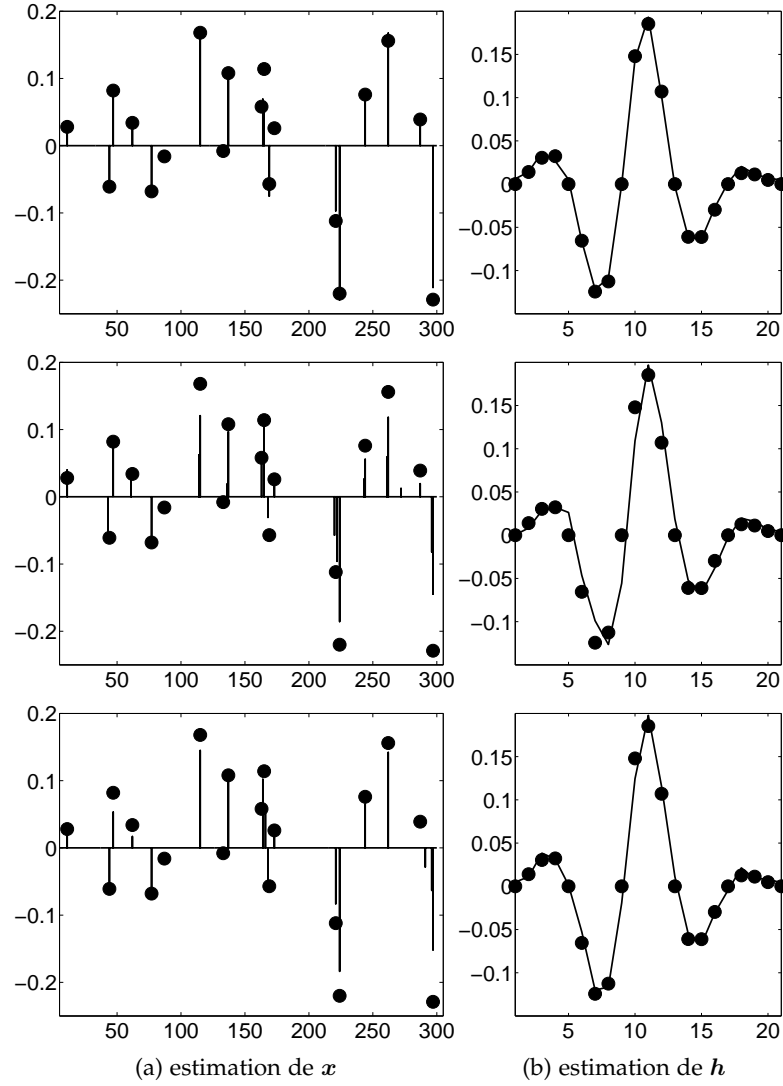


FIG. 3.3 – Trois estimations obtenues par l'échantillonneur de référence. Seule l'initialisation du générateur des nombres aléatoires est différente dans les chaînes.

est une sous-matrice composée des colonnes de  $\mathbf{V}$ , dont les indices correspondent aux  $i + \Omega$ . Par exemple,  $\mathbf{q}_{i+\Omega}$  (respectivement  $\mathbf{x}_{i+\Omega}$ ) est un  $K$ -tuplet de variables de Bernoulli (respectivement, leurs amplitudes gaussiennes).  $\mathbf{H}_{i+\Omega} = [\mathbf{H}_i, \dots, \mathbf{H}_{i+K-1}]$  indique la sous-matrice de taille  $N \times K$ . L'algorithme du tableau 3.6 s'inspire de l'idée de Bourguignon et Carfantan [2005], en l'adaptant à l'échantillonnage de Gibbs. Pour tout  $i = 1, \dots, M - K + 1$ ,  $\mathbf{y}_{i+\Omega}$  est rééchantillonné conjointement dans l'étape ① au lieu d'un rééchantillonnage scalaire de  $\mathbf{y}_i$  dans l'algorithme de référence qui correspond au cas  $K = 1$ .

En choisissant  $K > 1$ , l'algorithme est plus efficace (figure 3.2), mais il convient de noter que la complexité d'un tel échantillonneur  $K$ -tuplet augmente de façon exponentielle par rapport à  $K$  (le vecteur  $K$ -tuplet  $\mathbf{q}_{i+\Omega}$  compte en total  $2^K$  configurations possibles). Sont rapportés dans le tableau 3.7 les nombres d'itérations avant la première visite de la configuration exacte de  $\mathbf{q}$  pour différentes valeurs de  $K$ . Moins de 100 itérations sont nécessaires pour le 2-tuplet par rapport à quelques milliers d'itérations en utilisant l'échantillonneur de référence ( $K = 1$ ). Le nombre d'itérations diminue davantage pour les échantillonneurs 3-tuplet et 4-tuplet sur la même simulation.

TAB. 3.6 – Échantillonneur de Gibbs par  $K$ -tuple

- ① Pour tout  $i = 1 \dots, M - K + 1$ ,
  - (a) Échantillonner  $\mathbf{q}_{i+\Omega}^{(k+1)} | \mathbf{y}_{-(i+\Omega)}^{(k)}, \mathbf{h}^{(k)}, \sigma_\epsilon^{(k)}, \lambda^{(k)}, \mathbf{z}$
  - (b) Échantillonner  $\mathbf{x}_{i+\Omega}^{(k+1)} | \mathbf{y}_{-(i+\Omega)}^{(k)}, \mathbf{q}_{i+\Omega}^{(k+1)}, \mathbf{h}^{(k)}, \sigma_\epsilon^{(k)}, \mathbf{z}$
- ② Étape M-H pour  $(\mathbf{y}, \mathbf{h})$  et échantillonnage d'échelle du tableau 3.5
- ③ Échantillonner  $\sigma_\epsilon^{(k+1)} | \mathbf{x}^{(k+1)}, \mathbf{h}^{(k+1)}, \mathbf{z}$
- ④ Échantillonner  $\lambda^{(k+1)} | \mathbf{q}^{(k+1)}$
- ⑤ Échantillonner  $\sigma_h^{(k+1)} | \mathbf{h}^{(k+1)}$

TAB. 3.7 – Nombres d'itérations nécessaires avant la première visite pour 4 échantillonneurs  $K$ -tuple dans le cas de la figure 3.2, pour différentes graines du générateur de nombres aléatoires

graine	$K = 1$	$K = 2$	$K = 3$	$K = 4$
19	2415	21	4	1
29	1558	55	1	1
39	5137	12	1	1
49	7132	37	3	2

D'une manière générale, la convergence d'un algorithme MCMC est un compromis entre deux facteurs [Liu 2001, chapitre 7] :

- l'échantillonnage de chaque élément de la chaîne doit être simple à calculer (coût par itération) ;
- la chaîne de Markov induite doit converger assez rapidement vers la distribution invariante (nombre d'itérations).

La motivation de l'échantillonneur  $K$ -tuple par rapport à l'échantillonneur de référence, est de parvenir à une convergence plus rapide de la chaîne de Markov en réduisant considérablement le nombre d'itérations tandis que le coût de calcul par itération n'augmente que très raisonnablement.

### 3.7.2 Réalisation numérique

L'étape ①(a)(b) échantillonne conjointement  $\{\mathbf{q}_{i+\Omega}, \mathbf{x}_{i+\Omega}\}$  suivant la loi conditionnelle :

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{q}_{i+\Omega}, \mathbf{x}_{i+\Omega} | \text{reste}) &\propto P(\mathbf{z} | \mathbf{x}_{i+\Omega}, \mathbf{x}_{-(i+\Omega)}, \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2) \cdot P(\mathbf{x}_{i+\Omega} | \mathbf{q}_{i+\Omega}) \cdot P(\mathbf{q}_{i+\Omega} | \lambda) \\
 &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} \|\mathbf{e}_{K,i} - \mathbf{H}_{i+\Omega} \mathbf{x}_{i+\Omega}\|^2 \right\} \cdot g(\mathbf{x}_{i+\Omega}; \text{diag}(\mathbf{q}_{i+\Omega})) \cdot \lambda^{L_{i+\Omega}} (1 - \lambda)^{K - L_{i+\Omega}} \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

où

$$\mathbf{e}_{K,i} = \mathbf{z} - \mathbf{H}_{-(i+\Omega)} \mathbf{x}_{-(i+\Omega)},$$

tel que  $\mathbf{e}_{K,i}$  est une fonction de  $(\mathbf{x}_{-(i+\Omega)}, \mathbf{h}, \mathbf{z})$ , et non de  $(\mathbf{q}_{i+\Omega}, \mathbf{x}_{i+\Omega})$ . Les étapes ②-⑦ étant identiques à un échantillonneur de référence (on détaille dans le tableau 3.8 uniquement l'implémentation numérique de l'étape ①).

On constate d'abord que la loi conjointe  $P(\mathbf{q}_{i+\Omega}, \mathbf{x}_{i+\Omega} | \text{reste})$  dans l'équation (3.17) est analytiquement intégrable par rapport au vecteur  $\mathbf{x}_{i+\Omega}$  : le produit de deux gaussiennes reste une gaussienne. On échantillonne de la façon suivante pour la  $(k+1)$ -ième itération :

1. Échantillonner  $\mathbf{q}_{i+\Omega}^{(k+1)} \propto \int_{\mathbf{x}_{i+\Omega}} P(\mathbf{q}_{i+\Omega}, \mathbf{x}_{i+\Omega} | \text{reste}) d\mathbf{x}_{i+\Omega}$  ;
2. Échantillonner  $\mathbf{x}_{i+\Omega}^{(k+1)} \sim P(\mathbf{x}_{i+\Omega} | \mathbf{q}_{i+\Omega}^{(k+1)}, \text{reste})$ , soit l'équation (3.17) pour  $\mathbf{q}_{i+\Omega}^{(k+1)}$  fixe.

Il s'agit donc de calculer pour chaque configuration de  $\mathbf{q}_{i+\Omega}$  (un total de  $2^K$  configurations possibles), sa probabilité selon  $\int_{\mathbf{x}_{i+\Omega}} P(\mathbf{q}_{i+\Omega}, \mathbf{x}_{i+\Omega} | \text{reste}) d\mathbf{x}_{i+\Omega}$  à un facteur de normalisation près. On obtient après l'intégration de  $\mathbf{x}_{i+\Omega}$  :

$$P(\mathbf{q}_{i+\Omega} | \text{reste}) \propto \left( \frac{\lambda}{1-\lambda} \right)^{L_{i+\Omega}} |\mathbf{R}_\omega|^{1/2} \exp \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{m}_{i,\omega}^\top \mathbf{R}_\omega^{-1} \mathbf{m}_{i,\omega} \right\} \quad (3.18)$$

où

$$L_{i+\Omega} = \sum_{m \in i+\Omega} q_m \quad (3.19)$$

$$\mathbf{R}_\omega^{-1} = \frac{1}{\sigma_\epsilon^2} \mathbf{H}_\omega^\top \mathbf{H}_\omega + \mathbf{I}_{L_{i+\Omega}} \quad (3.20)$$

$$\mathbf{m}_{i,\omega} = \frac{1}{\sigma_\epsilon^2} \mathbf{R}_\omega \mathbf{H}_\omega^\top \mathbf{e}_{K,i} \quad (3.21)$$

Chaque configuration de  $\mathbf{q}_{i+\Omega}$  est caractérisée par l'ensemble  $\omega \subset \Omega = \{0, \dots, K-1\}$  tel que  $i+\omega = \{m \in i+\Omega | q_m = 1\}$  contient les indices des éléments non nuls de  $\mathbf{q}_{i+\Omega}$ , c'est-à-dire  $\mathbf{q}_{i+\omega} = \mathbf{1}$  et  $\mathbf{q}_{i+\Omega \setminus \omega} = \mathbf{0}$ .  $\mathbf{H}_{i+\omega} = [\mathbf{h}_m]_{m \in i+\omega}$  désigne la sous-matrice de  $\mathbf{H}$  de taille  $N \times L_{i+\omega}$ , composée des colonnes  $\mathbf{h}_m, m \in i+\omega$ , dans l'ordre croissant de  $m$ . Nous rappelons que  $\mathbf{H}$  est une matrice Toeplitz et, avec la condition de bord nulle sur la convolution,  $\mathbf{H}^\top \mathbf{H}$  est aussi une matrice Toeplitz :  $(\mathbf{H}_i)^\top \mathbf{H}_j = (\mathbf{H}^\top \mathbf{H})_{i,j}$  ne dépend pas des valeurs de  $i, j$ , mais de  $(i-j)$  seulement. Ainsi, la relation suivante est vraie pour tous les  $1 \leq i, j \leq M+K-1$  et toutes les configurations  $\omega$  :

$$(\mathbf{H}_{i+\omega})^\top \mathbf{H}_{i+\omega} = (\mathbf{H}_{j+\omega})^\top \mathbf{H}_{j+\omega} \quad (3.22)$$

Dans l'équation (3.20), on peut donc, pour simplifier, noter le terme  $(\mathbf{H}_{i+\omega})^\top \mathbf{H}_{i+\omega}$  par  $\mathbf{H}_\omega^\top \mathbf{H}_\omega$ . La même observation s'applique à d'autres quantités ( $\mathbf{R}_\omega^{-1}, \mathbf{Q}_\omega$ , etc) dans le tableau 3.8.

Une simplification dans l'implémentation numérique du tableau 3.8 consiste à effectuer une décomposition de Cholesky  $\mathbf{Q}_\omega = \text{chol}(\mathbf{R}_\omega^{-1})$  ( $\mathcal{O}(L_\omega^2)$ ), pour simplifier le calcul de  $\mathbf{R}_\omega$  et de son déterminant  $|\mathbf{R}_\omega|$ . En résumé, on obtient  $\{\mathbf{Q}_\omega, |\mathbf{R}_\omega|^{1/2}\}$  pour chaque configuration  $\omega$  avant de procéder au rééchantillonnage séquentiel par  $K$ -tuplet de  $\mathbf{y}_{i+\Omega}$  (tableau 3.8).

On note que dans l'étape ①(b),  $\mathbf{Q}_\omega$  sera réutilisé pour échantillonner la gaussienne multivariée  $\mathbf{x}_{i+\omega}$  suivant la loi  $\mathcal{N}(\mathbf{m}_{i,\omega}, \mathbf{R}_\omega)$ . On vérifie que  $\{\mathbf{Q}_\omega^{-1} \cdot \text{randn}(L_\omega, 1)\}$  génère une gaussienne centrée de variance  $\mathbf{R}_\omega$  puisque  $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{Q}_\omega^{-1} \mathbf{Q}_\omega^{-\top}$ .

Bien que cette méthode semble facile à mettre en oeuvre et efficace en termes de nombre d'itérations (voir résultat sur un jeu d'essai dans le tableau 3.7), le coût de calcul par itération croît de façon exponentielle par rapport à  $K$ . Or il n'existe pas d'indicateur pertinent quant à l'optimisation sur ce paramètre. Par exemple, les résultats de l'algorithme  $K$ -tuplet appliqué à la séquence de Mendel (figure 3.3) sont montrés dans le tableau 3.9. On précisera les critères de convergence dans la section 3.9 lors des tests de simulation plus complets. Un gain en nombre d'itérations (de 4600 à 900) est constaté en utilisant l'échantillonneur 2-tuplet par rapport à l'échantillonneur de référence. Le gain est toutefois moins important si nous augmentons encore  $K$ .

En résumé, les échantillonneurs  $K$ -tuplet (pour  $K > 2$ ) ont intégré la technique de permutation d'impulsion dans un cadre MCMC et par conséquent ne subissent

TAB. 3.8 – Étape 1(a),(b) de l'échantillonneur  $K$ -tuplet dans le tableau 3.6.

```

pour tout  $\omega \neq \emptyset, \omega \subset \Omega = \{0, \dots, K-1\}$  faire
   $L_\omega \leftarrow \dim(\omega)$ 
   $\mathbf{H}_\omega \leftarrow [\mathbf{h}_m] \mid_{m \in 1+\omega}$ 
   $\mathbf{S}_\omega \leftarrow 1/(\sigma_\epsilon^2) \mathbf{H}_\omega^\mathbf{t} \mathbf{H}_\omega + \mathbf{I}_{L_\omega} \% = \mathbf{R}_\omega^{-1}$  selon l'éq (3.20)
   $\mathbf{Q}_\omega \leftarrow \text{chol}(\mathbf{S}_\omega) \% \mathcal{O}(L_\omega^2)$  car  $\mathbf{R}_\omega^{-1}$  est Toeplitz
   $\alpha_\omega \leftarrow |\mathbf{Q}_\omega|^{-1} \% \mathcal{O}(L_\omega)$ , soit  $|\mathbf{R}_\omega|^{1/2}$ 
fin pour
pour  $i = 1$  to  $M - K + 1$  faire
   $\mathbf{e}_{K,i} \leftarrow \mathbf{z} - \mathbf{H}_{-(i+\Omega)} \mathbf{x}_{-(i+\Omega)}$ 
  pour tout  $\omega \neq \emptyset, \omega \subset \Omega = \{0, \dots, K-1\}$  faire
     $c_\omega \leftarrow \mathbf{Q}_\omega^{-\mathbf{t}} \mathbf{H}_{i+\omega}^\mathbf{t} \mathbf{e}_{K,i} / \sigma_\epsilon^2 \% |c_\omega|^2 = \mathbf{m}_\omega^\mathbf{t} \mathbf{R}_\omega^{-1} \mathbf{m}_\omega$ 
     $P_{i+\omega} \leftarrow \alpha_\omega \exp(|c_\omega|^2/2) (1/\lambda - 1)^{-L_\omega}$ 
  fin pour
   $P_{i+\emptyset} \leftarrow 1$ 
   $\% \text{ Étape } \textcircled{1}(\text{a})$ 
  Échantillonner  $\mathbf{q}_{i+\Omega} \propto P_{i+\omega}$ 
   $\% \text{ Étape } \textcircled{1}(\text{b}) : \mathbf{x}_{i+\omega} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_\omega, \mathbf{R}_\omega)$ 
   $\mathbf{x}_{i+\omega} \leftarrow \mathbf{Q}_\omega^{-1} (c_\omega + \text{randn}(L_\omega, 1))$ 
   $\mathbf{x}_{i+\Omega \setminus \omega} \leftarrow \mathbf{0}$ 
fin pour

```

TAB. 3.9 – Comparaison de convergence dans la famille  $K$ -tuplet ( $K = 1, \dots, 4$ ). Le nombre d'itérations sont indiqués pour chaque cas, par exemple, 4600 pour l'échantillonneur de référence et 900 pour celui de 2-tuplet, etc

	$K = 1$	$K = 2$	$K = 3$	$K = 4$
Nombre d'itérations	4600	900	700	600
Coût total (s)	915	202	285	452

plus la contrainte de validité mathématique de l'algorithme. L'exemple en simulation montre un cas où l'échantillonneur 2-tuplet atteint un meilleur compromis que celui de référence (le cas de  $K = 1$ ). Les résultats complets de simulation sont disponibles en section 3.9.

### 3.8 ÉCHANTILLONNEUR PARTIELLEMENT MARGINALISÉ

On discute ici d'un autre algorithme d'échantillonnage par une approche indirecte : en marginalisant  $\mathbf{x}$  dans la chaîne de Markov, l'échantillonneur de Gibbs converge plus rapidement vers la distribution invariante.

#### 3.8.1 Marginalisation partielle de $\mathbf{x}$

En principe, une variante de l'échantillonneur pourrait être de générer une chaîne de Markov sur  $\tilde{\Theta} = (\mathbf{q}, \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2, \sigma_h^2, \lambda)$  obtenue en marginalisant la loi *a posteriori* conjointe par rapport à  $\mathbf{x}$  :

$$P(\tilde{\Theta} | \mathbf{z}) = \int P(\Theta | \mathbf{z}) d\mathbf{x}. \quad (3.23)$$

puis de construire les estimateurs en trois étapes :

1. pour les paramètres binaires  $q_i$  : l'estimateur MAP marginal qui correspond au vote majoritaire des  $\{q_i^{(k)}\}$  ;
2. pour les paramètres continus  $\tilde{\Theta} \setminus \mathbf{q}$  : l'estimateur MMSE ;
3. pour  $\mathbf{x}$  : l'estimateur MMSE selon la loi conditionnelle  $P(\mathbf{x} | \hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{h}}, \hat{\sigma}_\epsilon^2, \hat{\sigma}_h^2, \hat{\lambda}, \mathbf{z})$  est analytique.

L'échantillonneur de Gibbs marginalisé avec une distribution d'intérêt  $P(\tilde{\Theta} | \mathbf{z})$  serait plus efficace que l'échantillonneur de référence, en particulier par rapport à  $\mathbf{q}$ . Les fondements théoriques se trouvent dans Liu et al. [1994] et Liu [2001, Chapitre 6.7] concernant la vitesse de convergence d'un échantillonneur de Gibbs marginalisé. Selon Liu [2001, Chapitre 6.7], l'échantillonneur de Gibbs marginalisé aura un gain considérable en termes d'itérations nécessaires pour que la chaîne converge, si les paramètres marginalisés sont fortement corrélés à d'autres paramètres dans la chaîne (voir aussi Cappé et al. [1999] et les références qui s'y trouvent). C'est précisément le cas pour  $(\mathbf{x}, \mathbf{q})$  dans le problème de déconvolution de séquence BG, à cause de la hiérarchie du modèle dans l'équation (3.3).

Cependant, la marginalisation de  $\mathbf{x}$  de la distribution *a posteriori* dans l'équation (3.23) est difficile à implémenter dans la pratique. Techniquement, elle n'est possible que pour l'échantillonnage conditionnel des paramètres  $(\mathbf{q}, \lambda, \sigma_h^2)$ . L'échantillonnage de  $\mathbf{h}$  devient extrêmement difficile lorsque  $\mathbf{x}$  est marginalisé, car la loi  $P(\mathbf{h} | \mathbf{q}, \sigma_h^2, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z})$  est une loi multivariée, non gaussienne avec une structure complexe. La même observation s'applique à l'échantillonnage de  $\sigma_\epsilon^2$ . Au lieu d'un échantillonneur de Gibbs standard sur  $\tilde{\Theta}$ , l'algorithme que l'on propose dans le tableau 3.10 vise à contourner les étapes de l'échantillonnage direct suivant les lois conditionnelles de  $\mathbf{h}$  et  $\sigma_\epsilon^2$ . Park et Van Dyk [2009] ont développé la théorie et les méthodes nécessaires pour appliquer l'algorithme de Gibbs partiellement marginalisé (« Partially Collapsed Gibbs » ou PCG), qui consiste à remplacer certaines étapes d'échantillonnage des lois conditionnelles par l'échantillonnage des lois marginales de la distribution jointe *a posteriori*. Une idée comparable est aussi trouvée dans la segmentation du signal par approche stochastique [Dobigeon et al. 2007a][Dobigeon et al. 2007b] où les hyperparamètres sont marginalisés partiellement.

Par rapport à l'échantillonneur de référence, la principale différence apparaît dans l'étape ①, où  $\mathbf{x}$  est marginalisé analytiquement. Champagnat et al. [1996] furent les premiers à exploiter la loi conditionnelle de chaque  $q_i$  dans ①(a) dans un contexte d'algorithme déterministe (SMLR) en marginalisant l'amplitude  $\mathbf{x}$ . On propose d'utiliser la même idée de marginaliser  $\mathbf{x}$  dans une approche par MCMC pour que l'échantillonnage itératif de  $q_i$  ne dépende plus des amplitudes. On montre que l'algorithme reste valide et que dans la même simulation que la figure 3.2 le nombre d'itérations nécessaire pour sortir d'un minimum local sera réduit.

Pour justifier la validité mathématique de l'algorithme dans tableau 3.10, on montre d'abord qu'un tel algorithme s'identifie à un échantillonneur de Gibbs dont la loi invariante suit l'équation (3.5), pour un balayage particulier de  $\Theta$ . On pose  $(q_1, \mathbf{x}), (q_2, \mathbf{x}), \dots, (q_M, \mathbf{x}), \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2, \lambda, \sigma_h^2$  la suite des paramètres rééchantillonnés par un échantillonneur de Gibbs. Pour le rééchantillonnage de  $(q_i, \mathbf{x}), i = 1, \dots, M$ , une procédure en deux étapes est considérée :

1. tirer  $q_i$  suivant  $P(q_i | \mathbf{q}_{1:i-1}, \mathbf{q}_{i+1:M}, \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2, \lambda, \mathbf{z})$  ;
2. tirer  $\mathbf{x}$  suivant  $P(\mathbf{x} | \mathbf{q}, \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2, \lambda, \mathbf{z})$ .

$\mathbf{x}$  est donc échantillonné  $M$  fois à l'intérieur de chaque itération tandis que la loi  $P(q_i | \mathbf{q}_{1:i-1}, \mathbf{q}_{i+1:M}, \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2, \lambda, \mathbf{z})$  ne dépend pas de  $\mathbf{x}$ . Les premières  $(M - 1)$  opérations

TAB. 3.10 – Échantillonneur partiellement marginalisé

①(a) Pour tout $i = 1 \dots, M$ , Échantillonner $q_i^{(k+1)}   q_{1:i-1}^{(k+1)}, q_{i+1:M}^{(k)}, h^{(k)}, \sigma_\epsilon^{(k)}, \lambda^{(k)}, z$ (b) Échantillonner $x^{(k+1)}   q^{(k+1)}, h^{(k)}, \sigma_\epsilon^{(k)}, z$
② Étape M-H pour $(y, h)$ et échantillonnage d'échelle du tableau 3.5
③ Échantillonner $\sigma_\epsilon^{(k+1)}   x^{(k+1)}, h^{(k+1)}, z$
④ Échantillonner $\lambda^{(k+1)}   q^{(k+1)}$
⑤ Échantillonner $\sigma_h^{(k+1)}   h^{(k+1)}$

d'échantillonnage de  $x$  peuvent donc être ignorées et la séquence des opérations coïncide exactement avec celle de l'échantillonneur de Gibbs partiellement marginalisé 3.10.

Une autre preuve mathématique [Ge et al. 2008] considère l'algorithme du tableau 3.10 comme un échantillonneur de Gibbs marginalisé dont la distribution d'intérêt s'écrit  $P(\tilde{\Theta} | z)$ , c'est-à-dire que  $x$  ne fait plus partie de l'état de la chaîne de Markov. La condition d'invariance de  $P(\tilde{\Theta} | z)$  est ensuite vérifiée pour l'algorithme en question. On réécrit d'abord le schéma d'algorithme dans le tableau 3.11, pour lequel  $x$  joue un rôle de paramètre caché dans l'étape ②. En posant  $\tilde{\Theta}' = (q, h', \sigma_\epsilon', \sigma_h, \lambda)$ , on vérifie que

TAB. 3.11 – Échantillonneur partiellement marginalisé, le même algorithme que le tableau 3.10

① Pour tout $i = 1 \dots, M$ , Échantillonner $q_i^{(k+1)}   q_{1:i-1}^{(k+1)}, q_{i+1:M}^{(k)}, h^{(k)}, \sigma_\epsilon^{(k)}, \lambda^{(k)}, z$
② (a) Échantillonner $x   q^{(k+1)}, h^{(k)}, \sigma_\epsilon^{(k)}, z$ (b) Échantillonner $h^{(k+1)}   x, \sigma_h^{(k)}, \sigma_\epsilon^{(k)}, z$ (c) Échantillonner $\sigma_\epsilon^{(k+1)}   x, h^{(k+1)}, z$
③ Étape M-H pour $(y, h)$ et échantillonnage d'échelle du tableau 3.5
④ Échantillonner $\lambda^{(k+1)}   q^{(k+1)}$
⑤ Échantillonner $\sigma_h^{(k+1)}   h^{(k+1)}$

la condition d'invariance de l'étape ② s'écrit :

$$\int_{h, \sigma_\epsilon} \kappa_2(h', \sigma_\epsilon' | \tilde{\Theta}, z) P(\tilde{\Theta} | z) dh d\sigma_\epsilon = P(\tilde{\Theta}' | z) \quad (3.24)$$

où  $\kappa_2$  désigne le noyau de transition qui correspond à l'étape ②(a)-(c) :

$$\kappa_2(h', \sigma_\epsilon' | \tilde{\Theta}, z) = \int_x \rho(x | \tilde{\Theta}, z) \rho(h' | x, \tilde{\Theta} \setminus h, z) \rho(\sigma_\epsilon' | x, \tilde{\Theta}' \setminus \sigma_\epsilon', z) dx. \quad (3.25)$$

Nous soulignons que l'équation (3.25) n'est pas obtenue par l'intégration de Monte Carlo. C'est l'expression exacte de  $\kappa_2$  pour le couple  $(h, \sigma_\epsilon)$  sachant que  $x$  n'est pas

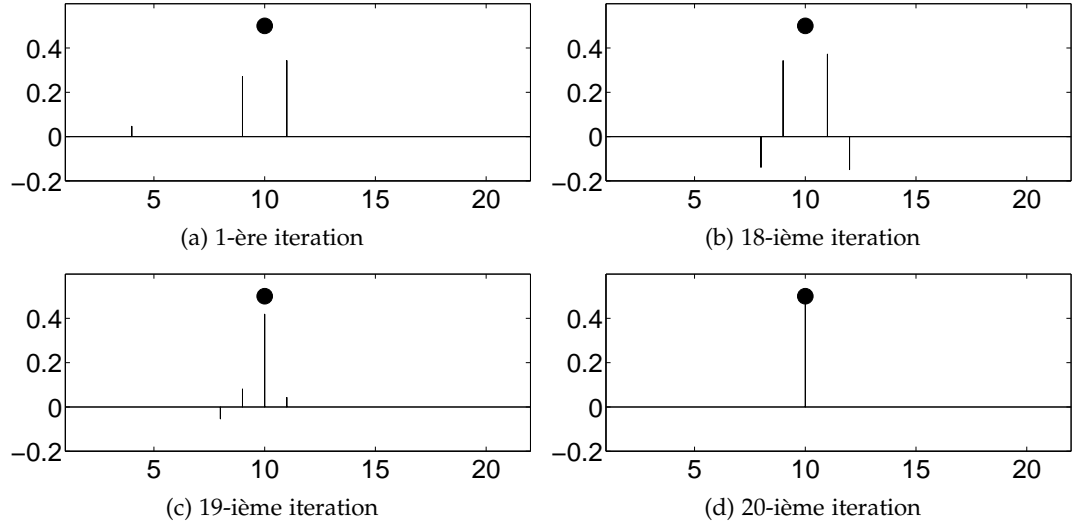


FIG. 3.4 – Séquences BG obtenues par l’algorithme de Gibbs partiellement marginalisé appliqué à l’exemple de la figure 3.2. La chaîne de Markov s’échappe rapidement de la configuration initiale.

dans la chaîne  $\{\tilde{\Theta}^{(k)}\}$ , d’où l’intégration. Il s’ensuit que la partie gauche de l’équation (3.24) s’écrit :

$$\begin{aligned}
 & \int \rho(x, \tilde{\Theta} | z) \rho(h' | x, \tilde{\Theta} \setminus h, z) \rho(\sigma'_\epsilon | x, \tilde{\Theta}' \setminus \sigma'_\epsilon, z) dh d\sigma_\epsilon dx \\
 &= \int \rho(x, \tilde{\Theta} \setminus h | z) \rho(h' | x, \tilde{\Theta} \setminus h, z) \rho(\sigma'_\epsilon | x, \tilde{\Theta}' \setminus \sigma'_\epsilon, z) d\sigma_\epsilon dx \\
 &= \int \rho(h', x, \tilde{\Theta} \setminus h | z) \rho(\sigma'_\epsilon | x, \tilde{\Theta}' \setminus \sigma'_\epsilon, z) d\sigma_\epsilon dx \\
 &= \int \rho(x, \tilde{\Theta}' \setminus \sigma'_\epsilon | z) \rho(\sigma'_\epsilon | x, \tilde{\Theta}' \setminus \sigma'_\epsilon, z) dx \\
 &= \int \rho(x, \tilde{\Theta}' | z) dx = \rho(\tilde{\Theta}' | z).
 \end{aligned}$$

Il est donc prouvé que la technique de la marginalisation partielle peut être appliquée pour générer une chaîne  $\{\tilde{\Theta}^{(k)}\}$  qui converge vers la distribution invariante  $P(\tilde{\Theta} | z)$ .

La figure 3.4 illustre l’application de l’algorithme à l’exemple de la figure 3.2 : la chaîne atteint la vraie configuration dans un nombre d’itérations acceptable. En outre, il est observé que l’algorithme est capable de modifier radicalement  $x$  en une seule itération (de la 18-ième à la 19-ième itération), une caractéristique directement liée à la marginalisation de  $x$  dans l’étape ① de l’échantillonneur.

### 3.8.2 Échantillonnage des variables de Bernoulli

Dans cette partie, une implémentation numérique de l’étape ① du tableau 3.10 est proposée, les autres étapes étant identiques aux celles dans l’échantillonneur de référence. On s’inspire de la méthode récursive dans Champagnat et al. [1996] pour l’évaluation séquentielle de la loi de Bernoulli  $P(q_i | \tilde{\Theta} \setminus q_i; z)$ . Cette dernière est basée sur la mise à jour d’une matrice  $L \times L$ , où  $L = \sum_i q_i$  ; on propose ici une stratégie encore moins coûteuse grâce à la factorisation de Cholesky. La complexité par itération est discutée dans cette partie, alors que les coûts totaux de calcul des algorithmes sont comparés dans la section 3.9 en simulation.

D’abord, comme détaillé dans Champagnat et al. [1996] la loi conditionnelle de  $q_i$



s'écrit :

$$P(q_i | \tilde{\Theta} \setminus q_i; \mathbf{z}) \propto |\mathbf{B}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{z}^t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{z}\right) \left(\frac{\lambda}{1-\lambda}\right)^{q_i} \propto \exp(-f(q_i)/2) \quad (3.26)$$

où

$$\mathbf{B} = \mathbf{H} \text{diag}\{\mathbf{q}\} \mathbf{H}^t + \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_N, \quad (3.27)$$

$$f(q_i) = \mathbf{z}^t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{z} + \ln |\mathbf{B}| + 2q_i \ln(1/\lambda - 1). \quad (3.28)$$

La normalisation de la probabilité  $P(q_i = 0 | \tilde{\Theta} \setminus q_i; \mathbf{z}) + P(q_i = 1 | \tilde{\Theta} \setminus q_i; \mathbf{z}) = 1$  permet de normaliser l'équation (3.26) et l'on obtient :

$$P(q_i | \tilde{\Theta} \setminus q_i, \mathbf{z}) = (1 + \exp(-(f(1-q_i) - f(q_i))/2))^{-1},$$

D'après l'équation (3.28),  $f(1-q_i) - f(q_i)$  est obtenu par [Champagnat et al. 1996] :

$$\begin{aligned} \tau_i &= \delta_i + \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{h}_i^t \tilde{\mathbf{B}}_0^{-1} \mathbf{h}_i \\ \tilde{\mathbf{B}}_i^{-1} &= \tilde{\mathbf{B}}_0^{-1} - \sigma_\epsilon^{-2} \tilde{\mathbf{B}}_0^{-1} \mathbf{h}_i \tau_i^{-1} \mathbf{h}_i^t \tilde{\mathbf{B}}_0^{-1} \\ |\tilde{\mathbf{B}}_i^{-1}| &= |\tilde{\mathbf{B}}_0^{-1}| \delta_i \tau_i \end{aligned} \quad (3.29)$$

où  $\tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B}/\sigma_\epsilon^2$ .  $\delta_i = \pm 1$  signifie l'ajout (+1) ou suppression (-1) d'une impulsion à l'endroit de la variable  $q_i$ .  $\tilde{\mathbf{B}}_i$  et  $\tilde{\mathbf{B}}_0$  ne se différencient que par  $q_i$ .

Une autre contribution de Champagnat et al. [1996] consiste à optimiser les techniques de mettre à jour la matrice de covariance  $\tilde{\mathbf{B}}$ . On remarque que la matrice  $\tilde{\mathbf{B}}$  (dans l'équation (3.27)) est parcimonieuse, on peut donc appliquer le lemme d'inversion matricielle de Woodbury afin d'optimiser la mise à jour de  $\tilde{\mathbf{B}}^{-1}$  via une autre matrice de dimension réduite. Soit  $\tilde{\mathbf{B}} = \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{G} \mathbf{G}^t + \mathbf{I}$ , où  $\mathbf{G} = \mathbf{H} \mathbf{D}$  et  $\mathbf{D}$  composée des colonnes non nulles de la matrice  $\text{diag}\{\mathbf{q}\}$  de manière à ce que  $\mathbf{D} \mathbf{D}^t = \text{diag}\{\mathbf{q}\}$ . On applique alors le lemme d'inversion matricielle sur  $\tilde{\mathbf{B}}$  (voir (A.24) dans l'annexe) :

$$\tilde{\mathbf{B}}^{-1} = \mathbf{I} - \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{G} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{G}^t \quad (3.30)$$

où  $\mathbf{C} = \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{G}^t \mathbf{G} + \mathbf{I}$  est une matrice de taille  $L \times L$ . Il suffit donc de mettre à jour la matrice  $\mathbf{C}^{-1}$  dans l'expression (3.30) pour chaque ajout ou suppression d'impulsion plutôt que de manipuler  $\tilde{\mathbf{B}}^{-1}$ , cette dernière étant de taille  $M \times M$ .

Pour la simplicité de notation, on donne ici les deux cas (ajout et suppression d'une impulsion) pour  $q_i, i = M$  (soit la dernière variable Bernoulli) alors que les autres cas sont invariants à une permutation près.

### Cas d'un ajout d'impulsion

$$\tau_i = 1 + \sigma_\epsilon^{-2} |\mathbf{h}|^2 - \sigma_\epsilon^{-4} \mathbf{h}_i^t \mathbf{G}_0 \mathbf{C}_0^{-1} \mathbf{G}_0^t \mathbf{h}_i \quad (3.31)$$

$$\mathbf{b} = -\sigma_\epsilon^{-2} \tau_i^{-1} \mathbf{C}_0^{-1} \mathbf{G}_0^t \mathbf{h}_i \quad (3.32)$$

$$\mathbf{C}_i^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_0^{-1} + \mathbf{b} \tau_i \mathbf{b}^t & \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^t & \tau_i^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

En combinant les équations (3.29) et (3.30), on obtient l'expression de  $\tau_i$ , où le vecteur  $\mathbf{G}^t \mathbf{h}_i$  est composé des coefficients d'auto-corrélation de  $\mathbf{h}$ . Par définition de  $\mathbf{C}$ , ajouter une impulsion conduit à

$$\mathbf{C}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_0 & \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{G}^t \mathbf{h}_i \\ \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{h}_i^t \mathbf{G} & 1 + \sigma_\epsilon^{-2} |\mathbf{h}|^2 \end{bmatrix}$$

d'où l'équation (3.33) en appliquant directement le lemme (A.25).

### Cas d'une suppression d'impulsion

Notez que dans le cas d'une suppression,  $\mathbf{b}$  et  $\tau_i$  sont extraits de  $\mathbf{C}_0^{-1}$  plutôt que par l'équation (3.32).

$$\mathbf{C}_0^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_i^{-1} + \mathbf{b}\tau_i\mathbf{b}^t & \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^t & \tau_i^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

#### 3.8.3 Décomposition de Cholesky

Enfin, nous proposons de réduire encore le coût de calcul et de mémoire, par la mise à jour et le stockage d'un facteur de Cholesky (une matrice triangulaire supérieure  $\mathbf{F}$  telle que  $\mathbf{F}^t\mathbf{F} = \mathbf{C}^{-1}$ ). Outre le fait que le facteur de Cholesky  $\mathbf{F}$  permet d'échantillonner ultérieurement l'amplitude  $\mathbf{x}$  à un coût réduit ( $\mathcal{O}(L^2)$ ), la stabilité numérique reconvenue de la décomposition de Cholesky est également une motivation. On déduit de l'équation (3.29) et (3.30) que :

$$\begin{aligned} \tau_i &= \delta_i + \sigma_\epsilon^{-2} \|\mathbf{h}_i\|^2 - \sigma_\epsilon^{-4} \|\mathbf{F}_0\mathbf{G}_0^t\mathbf{h}_i\|^2, \\ \mathbf{z}^t\tilde{\mathbf{B}}_0^{-1}\mathbf{h}_i &= \mathbf{z}^t\mathbf{h}_i - \sigma_\epsilon^{-2}(\mathbf{F}_0\mathbf{G}_0^t\mathbf{z})^t(\mathbf{F}_0\mathbf{G}_0^t\mathbf{h}_i). \end{aligned}$$

et de l'équation (3.28) et (3.29) que :

$$f(1 - q_i) - f(q_i) = \ln(\delta_i\tau_i) - \sigma_\epsilon^{-4}\tau_i^{-1}(\mathbf{z}^t\tilde{\mathbf{B}}_0^{-1}\mathbf{h}_i)^2 + 2\delta_i \ln\left(\frac{1}{\lambda} - 1\right) \quad (3.35)$$

Les avantages d'une telle décomposition de Cholesky sont doubles :

1. la loi conditionnelle de  $(\mathbf{x}|\tilde{\Theta};\mathbf{z})$  s'écrit

$$(\mathbf{x}|\tilde{\Theta},\mathbf{z}) \sim \mathcal{N}(\sigma_\epsilon^{-2}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}_0^t\mathbf{z}, \mathbf{C}^{-1}), \quad (3.36)$$

permettant d'échantillonner  $\mathbf{x}$  en  $\mathcal{O}(L^2)$  en utilisant  $\mathbf{F}$  (voir tableau 3.12);

2. la mise à jour de  $\mathbf{F}$  coûte également  $\mathcal{O}(L^2)$  avec la méthode de « CholUpdate ». On note  $\text{CholUpdate}(\mathbf{A}, \mathbf{d}, \pm')$  la méthode numérique de complexité  $\mathcal{O}(L^2)$  qui remet à jour le facteur Cholesky de  $\mathbf{A}^t\mathbf{A} \pm \mathbf{d}\mathbf{d}^t$  où  $\mathbf{A}$  est déjà une matrice triangulaire supérieure et  $\mathbf{d}$  un vecteur colonne. On donne ci-dessous le cas d'une adjonction ou d'une suppression d'impulsion en dernière position, les autres cas étant détaillés dans l'annexe A.6. Contrairement au cas d'un ajout à une position quelconque, supprimer une impulsion d'une position quelconque requiert deux opérations de CholUpdate (voir tableau 3.12).

Dans le cas d'un ajout d'impulsion, l'équation (3.33) se factorise par :

$$\mathbf{C}_i^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_0^t & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^t & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^t & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{b}\sqrt{\tau_i} \\ 1/\sqrt{\tau_i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b}\sqrt{\tau_i} \\ 1/\sqrt{\tau_i} \end{bmatrix}^t \quad (3.37)$$

Dans le cas d'une suppression selon l'équation (3.34), on a :

$$\mathbf{F}_0^t\mathbf{F}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_i^t\mathbf{F}_i + \mathbf{b}\tau_i\mathbf{b}^t & \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^t & \tau_i^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

$$\mathbf{F}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_0 & \mathbf{a} \\ \mathbf{0}^t & m \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

où  $\mathbf{S}_0$  est aussi une matrice triangulaire supérieure. Il s'ensuit que :

$$\mathbf{S}_0^t\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad (3.40)$$

$$\mathbf{S}_0^t\mathbf{S}_0 = \mathbf{F}_i^t\mathbf{F}_i + \mathbf{b}\tau_i\mathbf{b}^t \quad (3.41)$$

Donc  $\mathbf{F}_i = \text{CholUpdate}(\mathbf{S}_0, \mathbf{b}\sqrt{\tau_i}, -')$  (voir le tableau d'algorithme 3.12).

TAB. 3.12 – Étape 1 et 2(a) de l'échantillonneur de Gibbs partiellement marginalisé. La remise à jour de  $\mathbf{F}$  est donnée à une opération de permutation près.

```

Initialiser  $\mathbf{F}, \mathbf{G}$ 
% étape ① : échantillonnage séquentiel de  $\mathbf{q}$ 
pour  $i = 1$  to  $M$  faire
     $\delta_i \leftarrow (-1)^{q_i}$ 
     $\tau_i \leftarrow \delta_i + \sigma_\epsilon^{-2} \|\mathbf{h}\|^2 - \sigma_\epsilon^{-4} \|\mathbf{F}\mathbf{G}^t \mathbf{h}_i\|^2$ 
     $\phi \leftarrow \mathbf{z}^t \mathbf{h}_i - \sigma_\epsilon^{-2} (\mathbf{F}\mathbf{G}^t \mathbf{z})^t (\mathbf{F}\mathbf{G}^t \mathbf{h}_i)$  %  $\phi = \mathbf{z}^t \mathbf{B} \mathbf{h}$ 
     $\Delta f \leftarrow \ln(\delta_i \tau_i) - \sigma_\epsilon^{-4} \tau_i^{-1} \phi^2 + 2\delta_i \ln(1/\lambda - 1)$  % 1'Eq.(3.35)
    sample  $u \sim \mathcal{U}([0,1])$  % distribution uniforme dans  $[0,1]$ 
    si  $u > (1 + \exp(-\Delta f/2))^{-1}$  alors
         $q_i \leftarrow q_i + \delta_i$  %  $q_i + \delta_i$  est accepté
        si  $\delta_i == 1$  alors
             $\mathbf{b} \leftarrow -\sigma_\epsilon^{-2} \tau_i^{-1} \mathbf{F}^t \mathbf{F} \mathbf{G}^t \mathbf{h}_i$  % 1'Eq. (3.32)
             $\mathbf{F} \leftarrow \text{CholUpdate}([\mathbf{F} \ \mathbf{0}; \mathbf{0}^t \ 0], \sqrt{\tau_i}[\mathbf{b}; 1/\tau_i], ' +')$  % 1'Eq.(3.37)
        else % le cas de  $\delta_i = -1$  détaillé dans l'annexe
             $L \leftarrow \text{sum}(\mathbf{q})$ 
             $\mathbf{b} \leftarrow \mathbf{F}^t \mathbf{F}(:, i), \mathbf{v} \leftarrow \mathbf{b}_{-i}, \tau^{-1} \leftarrow \mathbf{b}_i$ 
            si  $i < L$  alors % autre que la dernière colonne
                 $\mathbf{e} \leftarrow \mathbf{F}(i, 1+i:L)^t$ 
                 $\mathbf{F}(1+i:L, 1+i:L) \leftarrow \text{cholupdate}(\mathbf{F}(1+i:L, 1+i:L), \mathbf{e}, ' +')$  %  $\mathcal{O}((L-i)^2)$ 
            fin si
             $\mathbf{F}(i,:) \leftarrow [], \mathbf{F}(:, i) \leftarrow []$  % Éliminer la  $i$ -ème ligne et colonne
             $\mathbf{F} \leftarrow \text{cholupdate}(\mathbf{F}, \tau^{1/2} \mathbf{v}, ' -')$  %  $\mathcal{O}(L^2)$ 
        fin si
         $\mathbf{G} \leftarrow \mathbf{H}(:, q == 1)$ 
    fin si % rien à faire si sans changements de  $\{q_i, \mathbf{F}\}$ 
fin pour
% étape ②(a) : échantillonnage de  $\mathbf{x}$ 
 $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{0}$ 
 $L \leftarrow \text{sum}(\mathbf{q})$ 
 $\mathbf{x}|_{q=1} \leftarrow \mathbf{F}^t (\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{F} \mathbf{G}^t \mathbf{z} + \text{randn}(L, 1))$  % 1'Eq. (3.36)

```

## 3.9 TEST EN SIMULATION

### 3.9.1 Diagnostic de convergence

Pour comparer empiriquement la qualité de convergence des différents algorithmes d'échantillonnage, on a recours à la méthode de Brooks et Gelman [1998], qui permet d'illustrer l'évolution d'un critère de convergence sur les chaînes de Markov. Ce diagnostic est fondé sur l'estimation des covariances des réalisations de  $m$  chaînes indépendantes notées  $\{\Phi_{jt}, j = 1, \dots, m; t = 1, \dots, n\}$  de longueur fixe  $n$ . Soit  $\bar{\Phi}_j$ . (respectivement  $\bar{\Phi}_{..}$ ) la moyenne locale (respectivement globale) des chaînes. La matrice de covariance intra-chaîne et inter-chaîne s'écrit alors :

$$\mathbf{V}_{\text{intra}} = \frac{1}{m(n-1)} \sum_{j=1}^m \sum_{t=1}^n (\Phi_{jt} - \bar{\Phi}_j.) (\Phi_{jt} - \bar{\Phi}_j.)^t$$

$$\mathbf{V}_{\text{inter}} = \frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m (\bar{\Phi}_j. - \bar{\Phi}_{..}) (\bar{\Phi}_j. - \bar{\Phi}_{..})^t$$

Brooks et Gelman [1998] proposent d'évaluer le critère MPSRF (*multivariate potential scale reduction factor*) :

$$\text{MPSRF} = \frac{n-1}{n} + \frac{m+1}{m} \lambda(\mathbf{V}_{\text{intra}}^{-1} \mathbf{V}_{\text{inter}})$$

où  $\lambda(\cdot)$  est la plus grande valeur propre (rayon spectral) d'une matrice définie positive. La convergence est diagnostiquée quand le critère MPSRF s'approche de 1 (*e.g.*,  $\text{MPSRF} < 1.2$  dans Brooks et Gelman [1998]). Pour tracer l'évolution du critère, chaque chaîne est divisée en  $b$  partitions d'échantillons, et le critère MPSRF est calculé sur les deuxièmes moitiés des échantillons, soit  $\{\Phi_{jt}\}, t = kb/2 + 1, \dots, kb$  de taille croissante  $kb$ . Les premières moitiés sont considérées comme la période de chauffe. Selon Brooks et Gelman [1998], on choisit la valeur de  $b \approx n/20$ .

### 3.9.2 Tests

Le but est de comparer la performance des échantillonneurs  $K$ -tuplet (section 3.7), y compris l'échantillonneur de référence ( $K = 1$ ) et l'échantillonneur partiellement marginalisé (section 3.8) en utilisant le critère de MPSRF par Brooks et Gelman [1998]. Les ambiguïtés temporelles et d'échelle sont déjà prises en compte (voir l'algorithme de référence du tableau 3.5) dans toutes les méthodes à comparer.

On teste d'abord les échantillonneurs sur la séquence de Mendel (pour laquelle on fixe  $M = 300$  et  $\lambda = 0.1$ ) comme dans la figure 3.3. On pose  $\Phi = \mathbf{q}$  pour l'évaluation du critère MPSRF sur 10 chaînes indépendantes, *i.e.*,  $m = 10$ . La figure 3.5 montre l'évolution du critère des échantillonneurs  $K$ -tuplet pour différentes valeurs de  $K$  : il tombe en dessous du seuil de 1.2 après 515-s pour l'échantillonneur de référence ( $K = 1$ ), 202-s pour l'échantillonneur de 2-tuplet et 285-s pour le 3-tuplet (voir aussi dans le tableau 3.9). On observe aussi que les deux échantillonneurs 3 et 4-tuplet ont un comportement plus stable une fois entrés dans la zone de convergence (le critère MPSRF passe en dessous de 1.2) tandis que celui de l'échantillonneur de référence a plus d'oscillation. Ces résultats confirment la discussion dans la section 3.7 : en augmentant  $K$ , la chaîne converge plus rapidement en terme de nombre d'itérations (également montré dans le tableau 3.9) alors que le coût de calcul par itération explose. Le coût total de calcul est bien un compromis entre les deux facteurs. Ce compromis optimal dans l'exemple de séquence de Mendel est atteint pour  $K = 2$ .

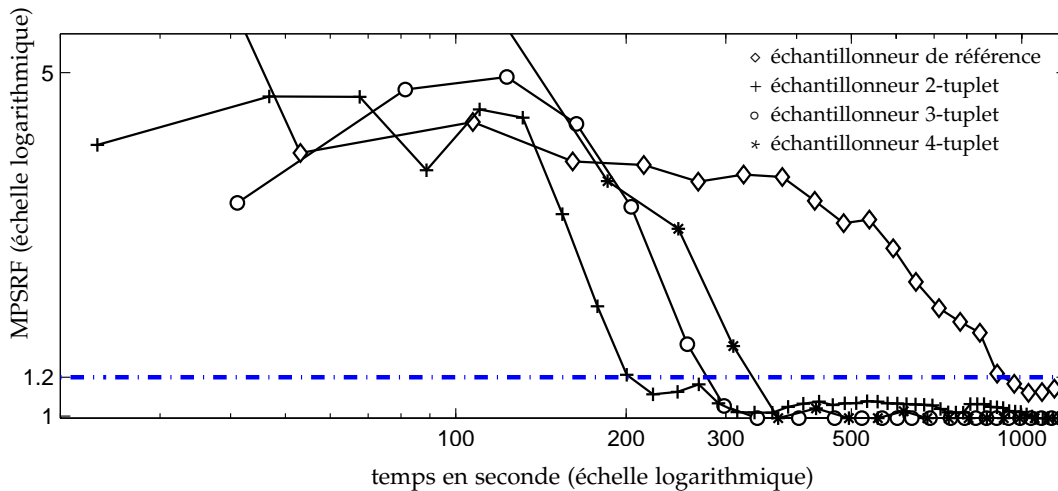


FIG. 3.5 – Evolution du critère MPSRF pour les échantillonneurs  $K$ -tuplet ( $K = 1, 2, 3$ ) dans le cas de séquence de Mendel (SNR = 12.81 dB).

Ensuite, le diagnostic de convergence est effectué sur l'échantillonneur partiellement marginalisé. Le critère MPSRF est évalué pour tous les  $b = 100$  itérations dans la figure 3.7. Soit 300 itérations nécessaires (en 116 secondes) pour que la chaîne converge, le niveau du MPSRF dans la zone de convergence reste relativement bas comparé à l'échantillonneur 2-tuplet.

Pour mieux illustrer la robustesse, les résultats de déconvolution obtenus par l'échantillonneur partiellement marginalisé sont donnés dans la figure 3.6 sous les mêmes conditions initiales que dans les simulations de la figure 3.3. L'estimation d'une seule chaîne est affichée car elles sont indiscernables les unes des autres. En pratique, les estimateurs issus de toutes les méthodes testées deviennent fiables lorsque le critère de convergence (MPSRF  $< 1.2$ ) est atteint.

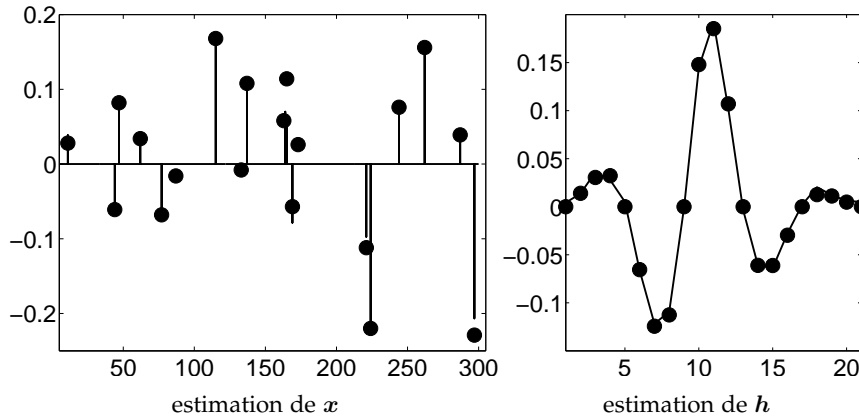


FIG. 3.6 – Estimation issue de l'échantillonneur partiellement marginalisé, sous la même condition initiale que dans la figure 3.3. Les 10 chaînes indépendantes fournissent des résultats indiscernables les uns des autres.

En conclusion, les tests précédents montrent que dans le cas de la séquence de Mendel ( $M = 300, \lambda = 0.1, \text{SNR} = 12.81 \text{ dB}$ ), l'échantillonneur partiellement marginalisé prend moins de temps à converger que l'échantillonneur le plus performant dans la famille de  $K$ -tuplet montré par la figure 3.5. On montre que le meilleur compromis entre le nombre d'itérations et le coût de calcul par itération [Liu 2001] est atteint par l'échantillonneur partiellement marginalisé parmi les algorithmes proposés : le coût de calcul pour la convergence est divisé par deux.

Or, cet algorithme n'est pas forcément adapté pour les problèmes de tailles ( $M$ ) très grandes. Notons que la complexité de la factorisation de Cholesky est de l'ordre de  $\mathcal{O}(L^2)$  ( $L = \sum q_i \approx \lambda M$ , soit le nombre d'impulsions détectées). La complexité par iteration des échantillonneurs  $K$ -tuplet reste  $\mathcal{O}(M)$  pour  $K$  fixé. Pour illustrer ce phénomène, il faut lancer tous les algorithmes pour une série de tests en simulation en fixant le paramètre de Bernoulli  $\lambda$  et faisant varier la taille de  $z$ . Dix chaînes indépendantes sont générées comme précédemment pour chaque test de simulation et pour chaque algorithme testé.

Au titre d'exemple, la figure 3.8 montre d'abord l'évolution de la complexité par iteration en fonction de  $M$  pour l'échantillonneur partiellement marginalisé et le 2-tuplet. Les interpolations quadratique et linéaire respective montrent que potentiellement ce dernier pourrait faire basculer le rapport de performance pour des problèmes de grande taille. La figure 3.9 résume l'évolution du temps de convergence pour les 5 échantillonneurs ( $K = 1, \dots, 4$  et échantillonneur partiellement marginalisé) dans les applications sur les données simulées dont la longueur des trains va de 100 à 1600 et  $\lambda = 10\%$ . Si l'échantillonneur partiellement marginalisé est montré plus performant

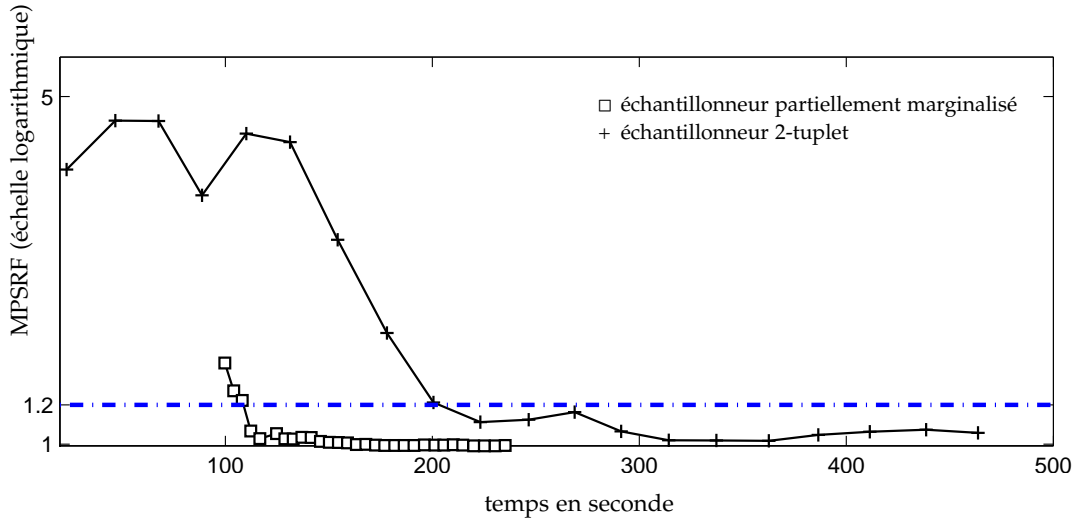


FIG. 3.7 – Comparaison du MPSRF entre l'échantillonneur partiellement marginalisé et le 2-tuplet dans le cas de la séquence de Mendel. Le critère est évalué toutes les 100 itérations pour les deux méthodes concernées.

que les autres algorithmes pour les données de petites tailles ( $M < 800$ ), l'évolution quadratique de son coût par itération (montré dans la figure 3.8) le rend moins efficace dans les applications de grandes tailles. Il s'ensuit que la longueur de la séquence impulsionnelle est un critère pour choisir entre les deux familles d'algorithmes proposés.

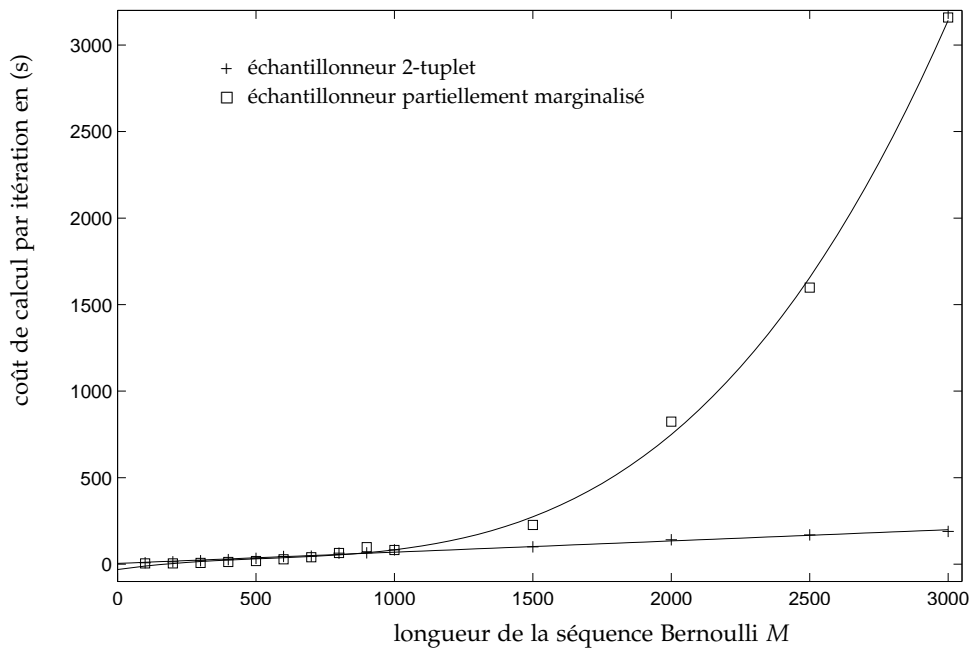


FIG. 3.8 – Comparaison de l'évolution des coûts par itération entre l'échantillonneur partiellement marginalisé et le 2-tuplet. Les deux méthodes sont testées sur les mêmes jeux de données  $z$ , pour lesquels la taille de la séquence à reconstruire  $M$  varie de 100 à 3000 tout en fixant le paramètre de Bernoulli  $\lambda = 10\%$ . Les interpolations polynomiales (de degré 1 et 2 respectivement) sont tracées.

### 3.10 CONCLUSION

Ce chapitre est dédié aux méthodes MCMC appliquées à la déconvolution aveugle d'une séquence Bernoulli Gaussienne. Les contributions de la littérature sont intégrées

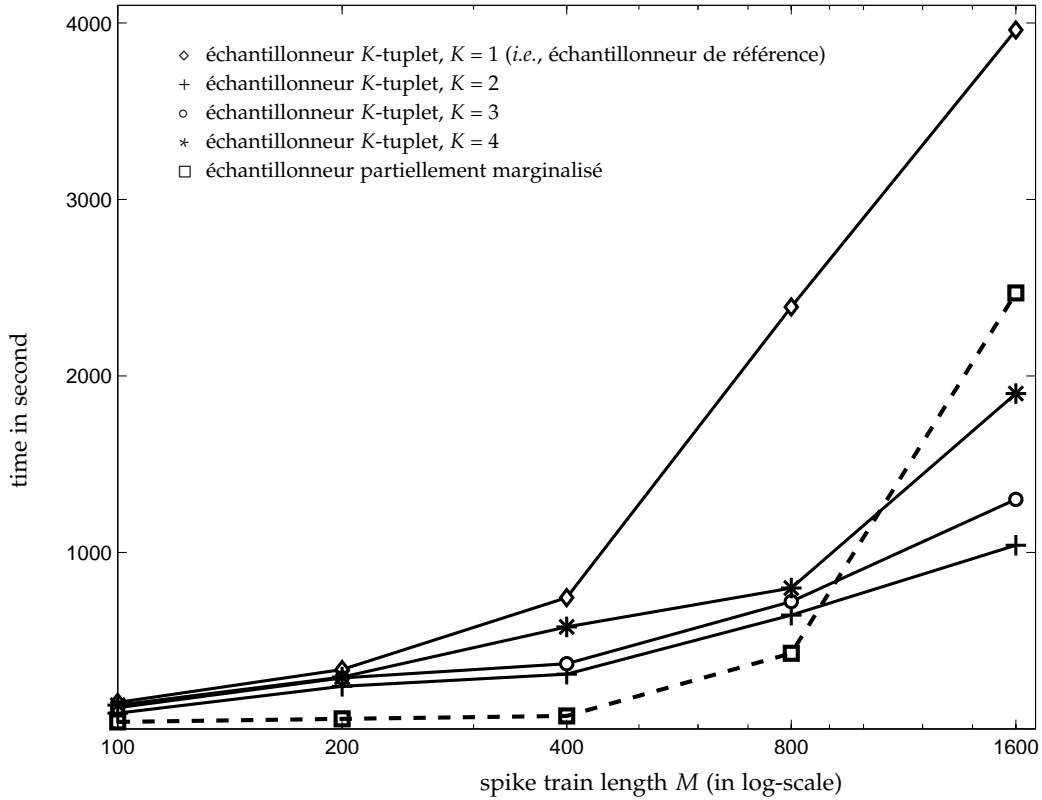


FIG. 3.9 – Comparaison de temps de convergence pour les 5 échantillonneurs appliqués à la déconvolution des trains impulsionnels de longueur croissante.

sous le nom d'échantillonneur de référence, et on a interprété le traitement de l'ambiguïté d'échelle proposé par Veit et al. [2009] comme un cas particulier de l'algorithme de Gibbs généralisé. Ensuite sont proposées deux méthodes d'échantillonnage plus efficaces vis-à-vis de l'exploration de la séquence de Bernoulli  $q$ . On montre que les deux méthodes donnent des échantillonneurs valides mathématiquement, c'est-à-dire que la chaîne de Markov générée suit la loi d'intérêt. De plus, les simulations montrent que les propriétés de convergence sont améliorées par rapport à l'échantillonneur de référence, au sens de Brooks et Gelman [1998].

D'un point de vue pratique, de nombreuses variables  $(q_i, x_i)$  sont simulées  $K$  fois dans l'algorithme de  $K$ -tuplet alors que cela n'est pas toujours nécessaire. Un algorithme de Gibbs reste valable tant que l'union des blocs recouvrent l'intégralité du signal. Il est donc intéressant d'envisager les techniques permettant de regrouper les variables d'une façon adaptative. Une autre perspective serait de combiner l'idée d'un échantillonneur par bloc et celle de la marginalisation partielle, c'est-à-dire échantillonner  $q_{i+\Omega} | q_{-(i+\Omega)}, h, \sigma_\epsilon, \lambda$  dans l'étape ① du tableau 3.10. Le nombre d'itérations pour que la chaîne converge serait encore réduit au prix d'un coût de calcul par itération plus élevé. Une telle technique s'avère intéressante pour les problèmes de déconvolution compliqués, souvent caractérisés par un bas niveau de RSB, une bande passante limitée de la réponse impulsionnelle  $h$ , et/ou une séquence de Bernoulli  $q$  moins parcimonieuse.

Dans le chapitre qui suit, on va adapter les méthodes proposées dans le présent chapitre au cas multi-sources, en vue de l'application à la décomposition de signaux EMG.

# DÉCOMPOSITION PAR MCMC

# 4

On propose dans le présent chapitre la décomposition par simulation stochastique *Monte Carlo par Chaîne de Markov* (MCMC) [Gelman et al. 1995, chapitre 11]. L'intérêt de la méthode MCMC par rapport à la maximisation itérative du chapitre 2 est double :

1. on ne s'occupe plus des paramètres tels que la taille de la liste de Tabou et le nombre d'itérations de la recherche Tabou à effectuer sur chaque segment ; la méthode MCMC est plus autonome pour une application non-supervisée ;
2. sur le plan théorique, on passe d'une méthode heuristique à une méthode par simulation stochastique dont la convergence en distribution est mathématiquement prouvée.

On introduira en outre, à l'aide des techniques d'intégration de variables gaussiennes présentées dans le chapitre 3, la variabilité sur les amplitudes des impulsions (les trains d'impulsions  $(1_{x_i})_i$  et les amplitudes associées seront échantillonnées conjointement). Comme auparavant, les variables continues ne poseront pas de difficulté car elles seront directement simulables selon les lois conditionnelles grâce aux choix des lois *a priori*. En ce qui concerne l'échantillonnage des trains d'impulsions dans un espace combinatoire, on développera une étape de type « Metropolis-Hastings » garantissant l'ergodicité de la chaîne de Markov, mais évitant le calcul d'une loi de probabilité sur un ensemble fini mais de grande taille et le tirage suivant cette loi.

## 4.1 MODÈLE D'AMPLITUDE VARIABLE

Au lieu de poser  $z = \sum_{i=1}^I \mathbf{h}_i * \mathbf{s}_i + \epsilon$  avec  $\mathbf{s}_i = 1_{x_i}$  (amplitude uniforme) comme modèle direct d'un signal EMG, on définit un train d'impulsions comme suit :

$$\mathbf{x}_i \sim (2\pi\sigma_i^2)^{-(n_i-1)/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2} \sum_{j=1}^{n_i-1} (\mathbf{x}_{i,j+1} - \mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{m}_i - \mathbf{T}_R)^2 \right\} 1_{\mathcal{C}}(\mathbf{x}_i) \quad (4.1)$$

$$\mathbf{s}_i | \mathbf{x}_i \sim \mathcal{N}(1_{x_i}, \sigma_{s_i}^2 \text{diag}(1_{x_i})). \quad (4.2)$$

où  $\mathcal{C}$  constitue l'ensemble des combinaisons admissibles compte tenu de la période réfractaire. Comme dans le cas d'un processus bernoulli-gaussien, on définit d'abord la fonction indicatrice  $(1_{x_i})$  pour décrire le même processus aléatoire de temps d'arrivée (voir section 1.3), et ensuite le train d'impulsions  $\mathbf{s}_i$  (dont les amplitudes varient) conditionnellement aux instants d'impulsions (4.2). Soit  $\text{diag}(1_{x_i})$  la matrice diagonale dont la diagonale est  $1_{x_i}$  (voir définition dans la section 3.2). Le paramètre de variabilité d'amplitudes  $\sigma_{s_i}^2$  est inconnu et pour chaque unité motrice on choisit une loi *a priori* conjuguée  $P(\sigma_{s_i}^2)$ .

Le fait d'échantillonner des variables binaires avec une contrainte de latence minimale ( $d_{\min}$ ) a fait l'objet de quelques travaux récents [Kail et al. 2009b][Kail et al.



2009a]. La méthode proposée consiste à simuler séquentiellement par bloc (la longueur de chaque bloc correspond à la latence minimale) les variables indicatrices à l'aide d'un échantillonneur de Gibbs et à imposer la contrainte de la latence minimale dès qu'on détecte un potentiel dans la séquence. Cette technique, dans le même esprit que l'algorithme de  $K$ -tuplet décrit dans la section 3.7, permet d'explorer plus librement les configurations des variables indicatrices dans un bloc, notamment pour un mouvement de déplacement d'un potentiel détecté. L'hypothèse de Kail et al. [2009a] sur la latence minimale réduit le cardinal des configurations admissibles dans chaque bloc à  $d_{\min} + 1$  comparé à  $2^{d_{\min}}$  dans le cas du modèle BG classique. Or, dans le contexte de décomposition de signaux EMG multi-source, l'échantillonnage conjoint des variables indicatrices  $(x_i)_i$  dans un bloc de longueur  $T_R$  (période réfractaire, la distance minimale entre impulsions) consisterait à évaluer  $(T_R + 1)^I \approx 100^I$  configurations si l'algorithme de Gibbs est appliqué. La complexité croît donc exponentiellement par rapport au nombre d'unités motrices actives  $I$ . Dans la suite, on envisage plutôt un algorithme d'échantillonnage par Metropolis-Hastings dont le coût de calcul par itération n'augmentera que linéairement par rapport à  $I$ .

La loi *a posteriori*  $P(\Theta^* | z)$ , pour  $\Theta^* = \{(s_i, x_i, h_i, m_i, \sigma_i^2, \sigma_{s_i}^2)_i, \sigma_\epsilon^2\}$ , s'écrit alors :

$$P(\Theta^* | z) \propto P(z | (s_i, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2) P(\sigma_\epsilon^2) \prod_{i=1}^I (P(s_i | x_i, \sigma_{s_i}^2) P(x_i | m_i, \sigma_i^2) P(m_i) P(\sigma_i^2) P(h_i) P(\sigma_{s_i}^2)) \quad (4.3)$$

Par rapport à la loi (1.7), une couche supplémentaire est rajoutée entre  $(s_i, x_i)$  dans le modèle (figure 4.1), dans le même esprit qu'un modèle BG sur  $(x, q)$  (voir chapitre 3).

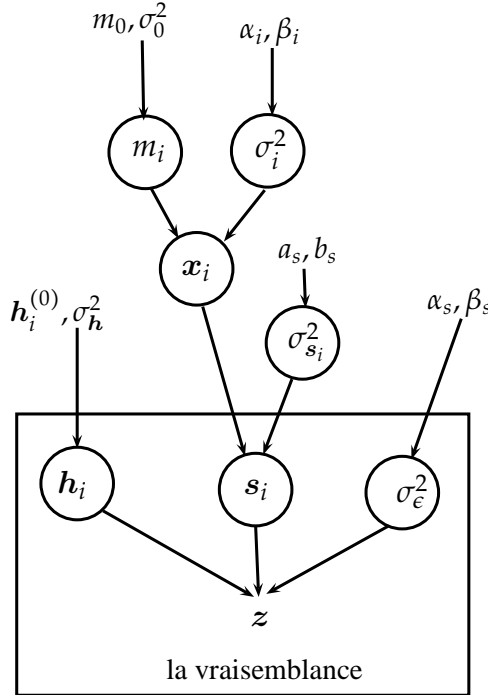


FIG. 4.1 – DAG du nouveau modèle bayésien hiérarchique. Les paramètres à estimer sont entourés de cercles.

Le problème d'ambiguïté d'échelle (voir section 3.5) surgit dans ce modèle car le paramètre d'échelle n'évolue que très lentement dans un algorithme de Gibbs où les échantillons successifs de  $h$  et de  $(s_i)_i$  sont fortement dépendants. Un rééchantillon-

nage d'échelle (voir section 3.5) permet d'équilibrer l'échelle entre le niveau des potentiels  $(h_i)_i$  et les amplitudes d'impulsions. Cette étape sera introduite en section 4.2.2.

## 4.2 MÉTHODE DE DÉCOMPOSITION PAR MCMC

Dans cette section, on présente l'algorithme de la deuxième phase de décomposition par MCMC en gardant les prétraitements de la section 2.1.

TAB. 4.1 – Algorithme de décomposition par MCMC

```

répéter
  pour  $k = 1, \dots, K$  faire % pour chaque segment, on marginalise  $(s_i)_i$ 
    Échantillonner  $(x_i)_i^{(k)} \sim P((x_i)_i^{(k)} | \Theta^* \setminus \{(s_i)_i, (x_i)_i^{(k)}\}, z)$  % étape M-H
  fin pour
  Échantillonner  $(s_i)_i \sim P((s_i)_i | \Theta^* \setminus (s_i)_i, z)$  % étape Gibbs
  Échantillonner  $(h_i)_i \sim P((h_i)_i | \Theta^* \setminus (h_i)_i, z)$  % étape Gibbs
  Échantillonner l'échelle  $s$ , puis  $(s_i, h_i) \leftarrow (ss_i, h_i/s)$  % Gibbs généralisé
  Échantillonner  $(m_i)_i \sim P((m_i)_i | \Theta^* \setminus (m_i)_i)$  % étape Gibbs
  Échantillonner  $(\sigma_i^2)_i \sim P((\sigma_i^2)_i | \Theta^* \setminus (\sigma_i^2)_i)$  % étape Gibbs
  Échantillonner  $(\sigma_{s_i}^2)_i \sim P((\sigma_{s_i}^2)_i | \Theta^* \setminus (\sigma_{s_i}^2)_i)$  % étape Gibbs
  Échantillonner  $\sigma_\epsilon^2 \sim P(\sigma_\epsilon^2 | \Theta^* \setminus \sigma_\epsilon^2, z)$  % étape Gibbs
jusqu'à Convergence

```

L'étape d'échantillonnage de  $(x_i)_i^{(k)}$  selon la loi conditionnelle  $P((x_i)_i^{(k)} | \Theta^* \setminus \{(s_i, x_i)_i^{(k)}\}, z)$  marginalisée par rapport aux amplitudes gaussiennes  $(s_i)_i$ , soit

$$P((x_i)_i^{(k)} | \Theta^* \setminus \{(s_i, x_i)_i^{(k)}\}, z) = \int P((s_i, x_i)_i^{(k)} | \Theta^* \setminus \{(s_i, x_i)_i^{(k)}\}, z) d(s_i)_i^{(k)}, \quad (4.4)$$

est réalisée par une étape d'acceptation-rejet (étape Metropolis-Hastings). L'échantillonnage des paramètres continus est effectué directement suivant leurs lois conditionnelles. Globalement, le schéma du tableau 4.1 ressemble aux schémas 3.10 et 3.11, et la validité mathématique pourrait être prouvée comme dans la section 3.8 : soit par un balayage particulier des paramètres dans  $\Theta^*$ , soit par démonstration de l'invariance de la loi cible  $P(\Theta^* \setminus (s_i)_i | z)$ .

Dans la suite de la section, on ne détaille que la méthode d'échantillonnage de  $(x_i)_i^{(k)}$  pour chaque segment, la méthode permettant de simuler  $(s_i)_i$  et la méthode de rééchantillonnage d'échelle  $s$ . Les lois conditionnelles des autres paramètres sont déjà précisées dans les sections 2.2.1- 2.2.4.

### 4.2.1 Échantillonnage de $(x_i)_i^{(k)}$

#### Marginalisation de $(s_i)_i^{(k)}$

Pour simplifier la notation, on réécrit la somme des produits de convolution  $\sum_{i=1}^I h_i * s_i$  par  $\mathbf{H}\mathbf{S}$ , où  $\mathbf{H} = [\mathbf{H}_1, \dots, \mathbf{H}_I]$  est composée de matrices de convolution telle que  $\mathbf{h}_i * \mathbf{s}_i = \mathbf{H}_i \mathbf{s}_i$  et  $\mathbf{S} = [s_1; \dots; s_I]$  représente un vecteur colonne de taille  $NI \times 1$  construit par concaténation.

Partant de l'équation (4.3), on obtient pour chaque segment  $k$  la loi conditionnelle de  $(s_i, x_i)_i^{(k)} | \text{reste}$  :

$$\begin{aligned}
 P((s_i, x_i)_i^{(k)} | \text{reste}) &\propto P(z^{(k)} | (s_i^{(k)}, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2) \prod_{i=1}^I \left( P(s_i^{(k)} | x_i^{(k)}, \sigma_{s_i}^2) P(x_i^{(k)} | m_i, \sigma_i^2, x_i^{(-k)}) \right) \\
 &\propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} |z^{(k)} - \mathbf{G}^{(k)} \mathbf{a}_1^{(k)}|^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} (\mathbf{a}_1^{(k)} - \mathbf{1})^t (\mathbf{V}^{(k)})^{-1} (\mathbf{a}_1^{(k)} - \mathbf{1})\right) \\
 &\quad |\mathbf{V}^{(k)}|^{-1/2} \delta(\mathbf{a}_0^{(k)}) \prod_{i=1}^I P(x_i^{(k)} | m_i, \sigma_i^2, x_i^{(-k)})
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

où

$$\begin{cases}
 \mathbf{G}^{(k)} &= \begin{bmatrix} (\mathbf{H}_1^{(k)})_{\mathbf{x}_1^{(k)}}, \dots, (\mathbf{H}_I^{(k)})_{\mathbf{x}_I^{(k)}} \end{bmatrix} \\
 \mathbf{d}^{(k)} &= \underbrace{[\sigma_{s_1}^2, \dots, \sigma_{s_1}^2]}_{\dim(\mathbf{x}_1^{(k)})}, \dots, \underbrace{[\sigma_{s_I}^2, \dots, \sigma_{s_I}^2]}_{\dim(\mathbf{x}_I^{(k)})} ]^t \\
 \mathbf{V}^{(k)} &= \text{diag}(\mathbf{d}^{(k)}) \\
 \mathbf{a}_1^{(k)} &= \begin{bmatrix} (s_1^{(k)})_{\mathbf{x}_1^{(k)}}, \dots, (s_I^{(k)})_{\mathbf{x}_I^{(k)}} \end{bmatrix} \\
 \mathbf{a}_0^{(k)} &= [s_1^{(k)}, \dots, s_I^{(k)}] \setminus \mathbf{a}_1^{(k)}
 \end{cases}$$

$\delta(\mathbf{a}_0)$  représente la fonction de dirac multidimensionnelle.  $\mathbf{d}^{(k)}$  (de taille  $(\sum_i \dim(\mathbf{x}_i^{(k)})) \times 1$ ) est la diagonale de la matrice diagonale de  $\mathbf{V}^{(k)}$ . Le vecteur  $\mathbf{1}$  dans l'équation (4.5) est un vecteur colonne de taille appropriée ( $\sum_i \dim(\mathbf{x}_i^{(k)})$  le cas échéant).  $\mathbf{a}_1^{(k)}$  et  $\mathbf{a}_0^{(k)}$  représentent respectivement le vecteur concaténé des amplitudes non nulles et son complément. L'ensemble  $\{\mathbf{a}_1^{(k)}, \mathbf{a}_0^{(k)}\}$  constitue donc un regroupement des variables  $[s_1^{(k)}, \dots, s_I^{(k)}]$ .

On remarque que  $\mathbf{G}^{(k)}$  et  $\mathbf{V}^{(k)}$  sont des fonctions de  $(x_i)_i^{(k)}, (h_i, \sigma_{s_i}^2)_i$ , et non des amplitudes  $(s_i)_i^{(k)}$ . Or, en intégrant d'abord  $\mathbf{a}_0^{(k)}$ , puis les variables  $\mathbf{a}_1^{(k)}$  par une technique comparable à celle de la section 3.7.2, on trouve la loi conditionnelle de  $(x_i)_i^{(k)}$  en marginalisant  $(s_i)_i^{(k)}$  dans l'équation (4.5) :

$$\begin{aligned}
 P((x_i)_i^{(k)} | \Theta^* \setminus (s_i, x_i)_i^{(k)}, z) &\propto |\Sigma^{(k)}|^{1/2} \exp\left(\frac{1}{2} (\mathbf{m}^{(k)})^t (\Sigma^{(k)})^{-1} \mathbf{m}^{(k)} - \frac{1}{2} \mathbf{1}^t (\mathbf{V}^{(k)})^{-1} \mathbf{1}\right) \\
 &\quad \prod_{i=1}^I \sigma_{s_i}^{-\dim(\mathbf{x}_i^{(k)})} P(x_i^{(k)} | m_i, \sigma_i^2, x_i^{(-k)})
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

où

$$\begin{cases}
 (\Sigma^{(k)})^{-1} &= \frac{1}{\sigma_\epsilon^2} (\mathbf{G}^{(k)})^t \mathbf{G}^{(k)} + (\mathbf{V}^{(k)})^{-1} \\
 \mathbf{m}^{(k)} &= \Sigma^{(k)} \left( \frac{1}{\sigma_\epsilon^2} (\mathbf{G}^{(k)})^t z^{(k)} + (\mathbf{V}^{(k)})^{-1} \cdot \mathbf{1} \right)
 \end{cases}$$

La marginalisation d'un vecteur gaussien dans une loi conditionnelle se trouve aussi dans le passage de l'équation (3.17) à (3.18) pour le problème de déconvolution d'un processus BG. Toutefois, un terme lié à  $\mathbf{1}$  est ajouté dans le cas présent dû à la modélisation des amplitudes gaussiennes non-centrées, c'est-à-dire on retrouve les mêmes expressions que dans l'équation (3.18) en posant  $\mathbf{0}$  à la place de  $\mathbf{1}$  dans l'équation (4.5).

**Remarque 4.1** Dans le cas particulier où  $(\mathbf{x}_i^{(k)})_i = \emptyset$ ,  $(\Sigma^{(k)})^{-1}$  et  $\mathbf{m}^{(k)}$  ne sont plus définis. Or, l'équation (4.5) se réduit à

$$P((\mathbf{s}_i^{(k)})_i = \mathbf{0}, (\mathbf{x}_i^{(k)})_i = \emptyset \mid \text{reste}) \\ \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2}|\mathbf{z}^{(k)}|^2\right) \delta((\mathbf{s}_i^{(k)})_i) \prod_{i=1}^I P(\mathbf{x}_i^{(k)} = \emptyset \mid m_i, \sigma_i^2, \mathbf{x}_i^{(-k)}).$$

En intégrant  $(\mathbf{s}_i^{(k)})_i$  et compte tenu du facteur commun  $\exp\left(-\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2}|\mathbf{z}^{(k)}|^2\right)$  par rapport aux cas où  $(\mathbf{x}_i^{(k)})_i \neq \emptyset$ , on trouve la probabilité suivante :

$$P((\mathbf{x}_i^{(k)})_i = \emptyset \mid \Theta^* \setminus (\mathbf{s}_i, \mathbf{x}_i)_i^{(k)}, \mathbf{z}) \propto \prod_{i=1}^I P(\mathbf{x}_i^{(k)} = \emptyset \mid m_i, \sigma_i^2, \mathbf{x}_i^{(-k)}) \quad (4.7)$$

L'ensemble des équations (4.6) et (4.7) décrit la loi conditionnelle de  $(\mathbf{x}_i^{(k)})_i$  à une normalisation près.

On note que le terme  $P(\mathbf{x}_i^{(k)} \mid m_i, \sigma_i^2, \mathbf{x}_i^{(-k)})$  est évalué de la même manière que dans l'équation (2.20), établie dans le cas où les amplitudes sont supposées constantes. On dispose donc de la loi conditionnelle pour chaque configuration de  $(\mathbf{x}_i^{(k)})_i$  à un facteur de normalisation près.

### Acceptation-Rejet

La loi conditionnelle de  $(\mathbf{x}_i^{(k)})_i$  (voir équations (4.6) et (4.7)) n'aboutit pas directement à une implémentation de l'algorithme de Gibbs. La difficulté majeure est l'exploration exhaustive des configurations de  $(\mathbf{x}_i^{(k)})_i$  dans l'espace de solutions admissibles  $\mathcal{C}_k$ . Pour avoir une idée de la cardinalité de l'espace  $\mathcal{C}_k$ , on calcule un sous-ensemble de  $\mathcal{C}_k$  contenant au plus une impulsion par unité motrice et on obtient la relation suivante :

$$2^{\dim(\text{Seg}_k) \cdot I} > |\mathcal{C}_k| > (1 + \dim(\text{Seg}_k))^I, \quad (4.8)$$

dans le cas où les frontières de  $\text{Seg}_k$  sont au moins séparées de la période réfractaire  $T_R$  par rapport aux segments consécutifs. Cette condition permet de placer une impulsion à n'importe quel instant du  $\text{Seg}_k$  tout en respectant la distance minimum de la période réfractaire, soit

$$\prod_{i=1}^I \left\{ \mathbf{x}_i^{(k)} \mid |1_{\mathbf{x}_i^{(k)}}|_1 \leq 1 \right\} \subset \mathcal{C}_k,$$

d'où la deuxième inégalité de l'équation (4.8). Dans une situation favorable où  $I = 5$  pour un segment de 10ms (ou 100 points échantillonnés), on obtient un nombre de configurations  $|\mathcal{C}_k| > 10^{10}$ , sachant que la durée d'un segment est au moins deux fois celle des potentiels (entre 4-6ms). La longueur des segments varie entre 8 et 60ms pour les signaux expérimentaux, tandis que le nombre d'unités motrices varie entre 4 et 8. La valeur de  $|\mathcal{C}_k|$  est donc au moins supérieure à  $4 \times 10^7$  et  $1.68 \times 10^{22}$  dans les deux cas extrêmes.

Pour éviter le coût de calcul irréaliste lié à l'évaluation des probabilités sur l'ensemble  $(\mathbf{x}_i^{(k)})_i \in \mathcal{C}_k$ , on propose une étape d'échantillonnage réversible [Ge et Le Carpentier 2009] de type « Metropolis-Hastings » n'explorant qu'un sous-ensemble de  $\mathcal{C}_k$  à chaque itération. On veille à ce que la chaîne de Markov

reste irréductible. Par conséquent, l'algorithme MCMC du tableau 4.1 devient un algorithme hybride, (« Metropolis-Hastings within Gibbs »).

Dans la structure de l'étape M-H,  $\omega(\mathbf{u}) \subset \mathcal{C}_k$  contient toutes les configurations accessibles à partir de la configuration courante  $\mathbf{u}$ . Par souci de simplicité, on désigne par  $\mathbf{u} = [1_{x_1^{(k)}}, \dots, 1_{x_l^{(k)}}]$  les trains d'impulsions concaténés, et par  $P(\mathbf{u})$  la probabilité définie dans les équations (4.6) et (4.7).

TAB. 4.2 – L'étape M-H pour les trains d'impulsions

1: Faire une proposition  $\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+$  selon la loi instrumentale :

$$q(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{u}^+ \notin \omega(\mathbf{u}) \\ P(\mathbf{u}^+)/F(\mathbf{u}) & \text{sinon} \end{cases}$$

où  $F(\mathbf{u}) = \sum_{\mathbf{y} \in \omega(\mathbf{u})} P(\mathbf{y})$ .

2: Accepter  $\mathbf{u}^+$  avec la probabilité  $\rho(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+) = \min\{1, F(\mathbf{u})/F(\mathbf{u}^+)\}$ .

Dans cette application, on définit  $\omega(\mathbf{u}) = \{\mathbf{v} \mid |\mathbf{u} - \mathbf{v}|_1 \leq 1\}$  avec  $|\bullet|_1$  la norme-L1. On vérifie les conditions suivantes :

1.  $\omega(\mathbf{u})$  contient toutes les configurations à une impulsion près de  $\mathbf{u}$  (soit par rajout ou suppression d'une impulsion);
2.  $\mathbf{u} \in \omega(\mathbf{v}) \Leftrightarrow \mathbf{v} \in \omega(\mathbf{u})$ , et  $\mathbf{u} \in \omega(\mathbf{u})$ , ce qui assure la réversibilité de la chaîne (voir la figure 4.2) : soit pour tout couple  $(\mathbf{u}, \mathbf{u}^+) \in \mathcal{C}_k$ ,

$$P(\mathbf{u})K(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+) = P(\mathbf{u}^+)K(\mathbf{u}^+ \mapsto \mathbf{u}).$$

$K(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+)$  exprime le noyau de transition dérivant de l'algorithme M-H du tableau 4.2 :

$$K(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+) = \begin{cases} \frac{P(\mathbf{u}^+)}{F(\mathbf{u})} \rho(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+) + r(\mathbf{u}) \delta_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^+) & \mathbf{u}^+ \in \omega(\mathbf{u}) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.9)$$

$$\text{où } r(\mathbf{u}) = \sum_{\mathbf{u}^+ \in \omega(\mathbf{u})} \frac{P(\mathbf{u}^+)}{F(\mathbf{u})} (1 - \rho(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}^+)) \quad (4.10)$$

3. la chaîne de Markov est irréductible, c'est-à-dire capable de parcourir l'ensemble de l'espace  $\mathcal{C}_k$  (cf démonstration);
4. la chaîne est apériodique car le noyau (4.9) satisfait la condition suivante :

$$\forall \mathbf{u}, P(\mathbf{u}) > 0, K(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}) > 0.$$

On vérifie que  $\frac{P(\mathbf{u})}{F(\mathbf{u})} > 0$  et  $\rho(\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}) = 1$ , d'où l'inégalité.

5. la complexité par itération reste linéaire par rapport à  $\dim(\text{Seg}_k)$  et  $I$ .

L'algorithme proposé génère une chaîne de Markov irréductible,  $P$ -invariante et apériodique, alors  $P$  est l'unique distribution invariante et la chaîne converge en distribution  $(K^n(\mathbf{u}, \bullet) \xrightarrow{\mathcal{D}} P)$  quel que soit l'état initial de  $\mathbf{u}$  selon Tierney [1994, théorème 1].

Une alternative est de définir  $\omega'(\mathbf{u}) = \{\mathbf{v} \mid |\mathbf{u} - \mathbf{v}|_1 \leq 2 \text{ et } ||\mathbf{u}|_1 - |\mathbf{v}|_1| \leq 1\}$ , autorisant de plus un déplacement d'une impulsion existante ou un remplacement de l'impulsion d'une unité motrice par celle d'une autre :

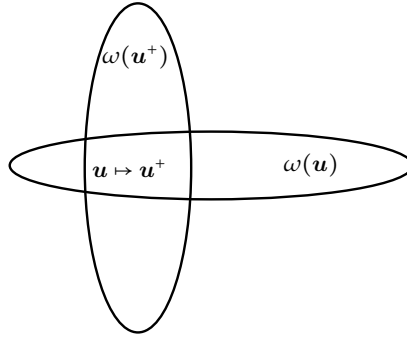


FIG. 4.2 – Illustration de la définition de voisinage

1.  $|u - v|_1 = 0 \Leftrightarrow u = v$ , soit  $u \in \omega'(u)$  ;
2.  $|u - v|_1 = 1$ , c'est-à-dire l'ajout ou la suppression d'une impulsion ;
3.  $|u - v|_1 = 2$  et  $||u|_1 - |v|_1| \leq 1$ , c'est-à-dire le déplacement d'une impulsion dans la même unité motrice ou vers une autre.

Ayant plus de souplesse par itération, cette définition vérifie également la condition de réversibilité en appliquant l'algorithme dans le tableau 4.2. L'inconvénient par rapport à la version  $\omega(u)$  est un nombre de configurations plus élevé à évaluer pour chaque itération.

Dans la littérature, l'algorithme MCMC à sauts réversibles (ou RJMCMC [Green 1995]) est le plus souvent utilisé pour simuler une distribution *a posteriori* dont les dimensions de paramètres sont variables. Dans la décomposition de signaux EMG, c'est typiquement le cas pour les vecteurs  $(x_i)_i$  dans l'espace  $\mathcal{C}$ , car le nombre total des impulsions est indéterminé. La proposition de Green [1995] est d'imposer des déplacements réversibles entre modèles (chacun correspond à une dimension fixe de paramètres). Les noyaux de transition doivent satisfaire la condition d'équilibre (*detailed balance*). En pratique, on restreint les déplacements d'un modèle à quelques modèles voisins, e.g., en augmentant ou diminuant la dimension du modèle par un. Cette technique est similaire à l'étape de M-H proposée. La structure de  $\omega(u)$  permet de réaliser un saut réversible entre les configurations de  $(x_i)_i^{(k)}$  dont l'écart entre les dimensions est au plus égale à un. Or, en formalisant l'algorithme par le vecteur binaire  $u$  de dimension fixe, on inclut implicitement les sauts dans  $\omega(u)$  sans changer la dimension du paramètre.

**Proposition 4.1** *L'étape 4.2 induit une chaîne de Markov irréductible.*

**Démonstration 4.1** *Pour démontrer l'irréductibilité, il suffit de montrer que pour tout  $u \in \mathcal{C}_k$ , tel que  $P(u) > 0$ , la probabilité de réaliser la trajectoire composée de  $\{u^{(0)} = \mathbf{0} \dots \mapsto u^{(i)} \mapsto \dots \mapsto u^{(L)} = u\}$ , où  $L = |u|_1$ ,  $|u^{(i)} - u^{(i-1)}|_1 = 1$  et  $|u^{(i)}|_1 - |u^{(i-1)}|_1 = 1$ , est non nulle. La réversibilité de la chaîne permet d'affirmer que la probabilité sur la trajectoire inverse est également non nulle, et par conséquent celle de passer d'un état quelconque à  $u$  tel que  $P(u) > 0$  l'est aussi.*

La trajectoire est construite en ajoutant une impulsion par itération. Il suffit alors de montrer que pour tout  $i$ ,

$$q(u^{(i-1)} \mapsto u^{(i)})\rho(u^{(i-1)} \mapsto u^{(i)}) > 0. \quad (4.11)$$

On vérifie que  $\mathbf{u}^{(i)} \in \omega(\mathbf{u}^{(i-1)})$ , qui permet d'écrire :

$$\begin{aligned} & q(\mathbf{u}^{(i-1)} \mapsto \mathbf{u}^{(i)}) \rho(\mathbf{u}^{(i-1)} \mapsto \mathbf{u}^{(i)}) \\ &= \frac{P(\mathbf{u}^{(i)})}{F(\mathbf{u}^{(i-1)})} \min \left\{ 1, \frac{F(\mathbf{u}^{(i-1)})}{F(\mathbf{u}^{(i)})} \right\} \\ &= \min \left\{ \frac{P(\mathbf{u}^{(i)})}{F(\mathbf{u}^{(i-1)})}, \frac{P(\mathbf{u}^{(i)})}{F(\mathbf{u}^{(i)})} \right\} \end{aligned}$$

Une condition suffisante de l'inégalité (4.11) est  $P(\mathbf{u}^{(i)}) > 0$  pour tout  $i$ . Or, la condition  $P(\mathbf{u}) > 0$  implique que  $P(\mathbf{u}^{(i)}) > 0$  est vrai pour tout  $i$ .  $\square$

**Remarque 4.2** La démonstration est basée sur la définition de  $\omega(\mathbf{u}) = \{\mathbf{v} \mid \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|_1 \leq 1\}$ . Une trajectoire plus courte est envisageable lorsque les déplacements d'impulsions et les remplacements sont autorisés dans une itération (le cas de  $\omega'(\mathbf{u})$ ). Celle ci est bien plus réaliste que de passer par l'état  $\mathbf{0}$ .

**Remarque 4.3** Les conditions de la réversibilité et de l'irréductibilité du noyau de transition garantit que la chaîne converge vers la loi stationnaire unique.

#### 4.2.2 Échantillonnage de $(s_i)_i$

En s'inspirant de la technique d'intégration des variables gaussiennes dans l'équation (4.6), on exprime d'abord la loi conditionnelle conjointe :

$$\begin{aligned} P((s_i, x_i)_i \mid \text{reste}) &\propto P(z \mid (s_i, h_i)_i, \sigma_\epsilon^2) \prod_{i=1}^I (P(s_i \mid x_i, \sigma_{s_i}^2) P(x_i \mid m_i, \sigma_i^2)) \\ &\propto \exp \left( -\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} |z - \mathbf{G}\mathbf{a}_1|^2 \right) |\mathbf{V}|^{-1/2} \exp \left( -\frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 - \mathbf{1})^t \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{a}_1 - \mathbf{1}) \right) \\ &\quad \delta(\mathbf{a}_0) \prod_{i=1}^I P(x_i \mid m_i, \sigma_i^2) \end{aligned} \quad (4.12)$$

où les termes  $\mathbf{G}, \mathbf{V}, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_0$  sont définis par une concaténation de  $\mathbf{G}^{(k)}, \mathbf{V}^{(k)}, \mathbf{a}_1^{(k)}, \mathbf{a}_0^{(k)}$  sur tous les segments :

$$\begin{cases} \mathbf{G} &= [\mathbf{G}^{(1)}, \dots, \mathbf{G}^{(K)}] \\ \mathbf{d} &= [\mathbf{d}^{(1)}; \dots; \mathbf{d}^{(K)}] \\ \mathbf{V} &= \text{diag}(\mathbf{d}) \\ \mathbf{a}_1 &= [\mathbf{a}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{a}_1^{(K)}] \\ \mathbf{a}_0 &= [\mathbf{a}_0^{(1)}, \dots, \mathbf{a}_0^{(K)}] \end{cases}$$

En fixant les trains d'impulsions  $(x_i)_i$  dans l'équation (4.12), on obtient

$$\begin{cases} P(\mathbf{a}_1 \mid \Theta^* \setminus (s_i)_i) \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}, \Sigma), & P(\mathbf{a}_0 \mid \Theta^* \setminus (s_i)_i) = \delta(\mathbf{a}_0) \\ \Sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma_\epsilon^2} \mathbf{G}^t \mathbf{G} + \mathbf{V}^{-1}, & \mathbf{m} = \Sigma \left( \frac{1}{\sigma_\epsilon^2} \mathbf{G}^t \mathbf{z} + \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{1} \right) \end{cases} \quad (4.13)$$

Il est facile de démontrer que  $\mathbf{G}^t \mathbf{G}$  est une matrice diagonale par blocs (chacun de taille  $(\sum_i x_i^{(k)}) \times (\sum_i x_i^{(k)})$ , soit le nombre d'impulsions détectées dans chaque segment); les produits hors de la diagonale sont nuls, c'est-à-dire  $(\mathbf{G}^{(i)})^t \mathbf{G}^{(j)} = \mathbf{0}, i \neq j$ , car les instants d'impulsions dans deux segments distincts sont au moins séparés de  $2P$  (deux

fois la longueur de  $\mathbf{h}_i$ , voir section 2.1). La matrice  $\Sigma^{-1}$  est donc diagonale par blocs. Echantillonner conjointement  $\mathbf{a}_1$  suivant la loi conditionnelle (4.13) donnera exactement les mêmes résultats que d'échantillonner bloc par bloc (segment par segment) les amplitudes  $\mathbf{a}_1^{(k)}$  suivant  $\mathcal{N}(\mathbf{m}^{(k)}, \Sigma^{(k)})$ .

Le modèle gaussien des amplitudes ne pose pas de contrainte sur la positivité des amplitudes. Or, en réalité un potentiel de signe opposé ne caractérise plus la même unité motrice. On verra dans la section 4.4.1 que de telles solutions  $(\mathbf{x}_i)_i^{(k)}$  peuvent être proposées et acceptées par la chaîne et qu'ensuite certaines amplitudes échantillonnées suivant la loi (4.12) sont négatives.

### 4.2.3 Rééchantillonnage d'échelle

On discute ensuite l'avantage d'un rééchantillonnage d'échelle et son implémentation.

Contrairement à la méthode du chapitre 2 où les amplitudes d'impulsions sont supposées constantes, l'introduction de la variabilité dans le modèle (voir figure 4.1) sur les amplitudes a pour effet d'induire l'ambiguïté d'échelle sur les couples  $(\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i)$ . Soit pour tout  $s \neq 0$ ,

$$\mathbf{h}_i * \mathbf{s}_i = (\mathbf{h}_i/s) * (\mathbf{s}_i \cdot s)$$

On prendra soin dans la suite de ne pas inverser les signes de  $(\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i)$  en se limitant à  $s > 0$ . Le rééchantillonnage d'échelle est utile pour la même raison que celle évoquée dans la section 3.5 : les potentiels  $\mathbf{h}$  sont échantillonnés suivant la loi  $P(\mathbf{h} | (\mathbf{s}_i)_i, \mathbf{h}^{(0)}, \sigma_{\epsilon}^2, \sigma_{\mathbf{h}}^2, \mathbf{z})$  dans laquelle se trouvent les amplitudes des  $(\mathbf{s}_i)_i$ , tandis que l'échantillonnage des amplitudes est ensuite conditionné aux valeurs de  $\mathbf{h}$  (voir le tableau d'algorithme 4.3).

Le rééchantillonnage d'échelle sera appliqué séparément sur chaque couple de  $(\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i)$ . Par ailleurs, la loi *a posteriori* des échelles conjointes est séparable de par l'hypothèse d'indépendance des sources. Pour l'étape d'échantillonnage d'échelle, on suit le schéma de Gibbs généralisé dans le tableau 3.4. Soit le groupe de transformation d'échelle  $\gamma_s \in \Gamma$  défini par :

$$(\mathbf{s}_i, \mathbf{h}_i) \xrightarrow{\gamma_s} (s\mathbf{s}_i, \mathbf{h}_i/s), s \in \mathbf{R}^+. \quad (4.14)$$

On note d'abord que la transformation d'échelle  $\gamma_s$  n'affecte pas le terme de vraisemblance, soit

$$P(\mathbf{z} | \gamma_s(\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i), \Theta \setminus (\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i)) = P(\mathbf{z} | \Theta), \gamma_s \in \Gamma.$$

La mesure de Haar s'écrit  $H(d\gamma_s) = |s|^{-1}d\gamma_s$  pour le groupe abélien  $\Gamma$ . La jacobienne de la transformation vaut

$$|J_{\gamma_s}(\gamma_s(\mathbf{s}_i, \mathbf{h}_i))| = s^{M-P}, \quad (4.15)$$

où  $\dim(\mathbf{s}_i) = M$  et  $\dim(\mathbf{h}_i) = P$ . L'échantillonnage de  $\gamma_s$  s'effectue donc suivant la loi



suivante

$$\begin{aligned}
\gamma_s &\sim P(\gamma_s(\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i), \Theta \setminus (\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i) | \mathbf{z}) | J_{\gamma_s}(\gamma_s(\mathbf{s}_i, \mathbf{h}_i)) | H(d\gamma_s) \\
&\propto P(\mathbf{z} | \gamma_s(\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i), \Theta \setminus (\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i)) P(\gamma_s(\mathbf{s}_i, \mathbf{h}_i)) s^{M-P-1} \\
&\propto P(\mathbf{z} | \Theta) P(\gamma_s(\mathbf{s}_i, \mathbf{h}_i)) s^{M-P-1} \\
&\propto s^{-(M-n_i)} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_{\mathbf{h}}^2} \left\| \frac{\mathbf{h}_i}{s} - \mathbf{h}_i^{(0)} \right\|^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_{\mathbf{s}_i}^2} \|\mathbf{s}\mathbf{a}_1 - \mathbf{1}\|^2 \right\} s^{M-P-1} \\
&\propto s^{n_i-P-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_{\mathbf{h}}^2} \left\| \frac{\mathbf{h}_i}{s} - \mathbf{h}_i^{(0)} \right\|^2 - \frac{1}{2\sigma_{\mathbf{s}_i}^2} \|\mathbf{s}\mathbf{a}_1 - \mathbf{1}\|^2 \right\}
\end{aligned} \tag{4.16}$$

où

1. le terme  $P(\mathbf{z} | \Theta)$  disparaît car il est invariant par rapport à  $\gamma_s$  ;
2. chaque train d'impulsion  $\mathbf{s}_i$  se décompose en  $\mathbf{a}_0 \sim \delta(\mathbf{0})$  et  $\mathbf{a}_1 \sim \mathcal{N}(\mathbf{1}, \sigma_{\mathbf{s}_i}^2 \mathbf{I})$  (voir l'équation (4.5)) ;
3. le terme  $s^{-(M-n_i)}$  vient de l'expression

$$\delta(\mathbf{s}\mathbf{a}_0) = s^{-(M-n_i)} \delta(\mathbf{a}_0),$$

sachant que  $\dim(\mathbf{a}_0) = M - n_i$  et  $\dim(\mathbf{a}_1) = n_i$ .

**Remarque 4.4** La loi de l'échelle du couple  $(\mathbf{h}_i, \mathbf{s}_i)$  est exprimée dans (4.16) et l'on vérifie que la loi conjointe des échelles est un produit de telles lois pour tout  $i$ .

Le simulateur de la loi (4.16) est réalisé par la méthode de rejet [Dagpunar 1988] (annexe A.7), de même que la loi GIG (section 3.5).

### Alternative au problème d'échelle

Le problème d'échelle entre les couples  $(\mathbf{s}_i, \mathbf{h}_i)_i$  est principalement dû à l'échelle des  $(\mathbf{h}_i^{(0)})_i$ , les moyennes des lois *a priori* sur  $(\mathbf{h}_i)_i$ . Ces potentiels approximatifs obtenus par le prétraitement (sur une durée limitée du signal) sont souvent biaisés en échelle. Il serait donc plus judicieux de fixer dans les lois *a priori* non pas les moyennes, mais les formes de ces moyennes en laissant un degré de liberté sur l'échelle, c'est-à-dire sous la forme de :

$$\mathbf{h}_i \sim \mathcal{N}(e_i \cdot \mathbf{h}_i^{(0)}, \sigma_{\mathbf{h}}^2 \mathbf{I}_P), \quad e_i > 0 \tag{4.17}$$

où  $e_i$  est un paramètre supplémentaire sur l'échelle défini sur un support positif. On choisira une loi *a priori* conjuguée  $P(e_i)$  pour faciliter l'échantillonnage suivant sa loi conditionnelle dans l'algorithme MCMC :

$$P(e_i | \text{reste}) \propto P(\mathbf{h}_i | e_i, \mathbf{h}_i^{(0)}, \sigma_{\mathbf{h}}^2) P(e_i)$$

On note que le premier terme (qui correspond à la vraisemblance) est gaussien, la loi conjuguée sera donc également gaussienne. Or, le support d'une loi gaussienne ne respecte pas la condition de la positivité d'échelle. On est de nouveau confronté à un problème du choix de loi *a priori* appropriée, c'est-à-dire qui soit à la fois conjuguée et avec un support positif. Une loi *a priori* gaussienne tronquée remplit les deux conditions et conduit à une loi conditionnelle numériquement implémentable pour l'échantillonnage. Soit,

$$P(e_i) \propto g(e_i; \mu_e, \sigma_e^2) 1_{\mathbf{R}^+} \tag{4.18}$$

la loi gaussienne tronquée (sur le support positif) de moyenne  $\mu_e$  et de variance  $\sigma_e^2$  connue.

### 4.3 IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE

On résume dans le tableau 4.3 l'implémentation de la méthode MCMC pour la décomposition complète de signal EMG. Il faut noter que dans l'échantillonnage des amplitudes les matrices notées  $\mathbf{G}$ ,  $\mathbf{V}$ ,  $\Sigma^{-1}$ ,  $\mathbf{Q}$  sont de taille  $\sum_i \dim(\mathbf{x}_i^{(k)})$ , soit le nombre d'impulsions détectées pour toutes les unités motrices actives dans le segment courant. La manipulation de ces matrices est peu coûteuse grâce à la parcimonie d'impulsions. Par contre, l'évaluation de  $F_{\mathbf{u}}$  et  $F_{\mathbf{u}^*}$  consiste à calculer les probabilités de l'équation (4.6) ou (4.7) pour chaque configuration dans  $\omega(\mathbf{u})$  et  $\omega(\mathbf{u}^*)$ , c'est-à-dire  $\mathcal{O}(\dim(\omega(\mathbf{u})))$  et  $\mathcal{O}(\dim(\omega(\mathbf{u}^*)))$  respectivement.

### 4.4 TESTS ET VALIDATION

Les modalités d'acquisition des signaux EMG et d'obtention des résultats de référence par la décomposition manuelle [McGill Jul 2002, McGill et al. Dec 2005] sont les mêmes que dans la section 2.3.

On discute d'abord la contrainte de positivité sur les amplitudes des impulsions. Le modèle gaussien des amplitudes autorise une variation sur la totalité du support réel, y compris des cas dégénérés avec des impulsions négatives ou de très faibles valeurs. L'exemple typique d'amplitude négative dans la chaîne de Markov est montré dans la figure 4.3.

On illustre ensuite les résultats de l'estimateur MMSE des amplitudes d'impulsions conditionnellement à la détection des trains, ces derniers étant obtenus par vote majoritaire (MAP marginal) pour chaque instant (voir la figure 4.4).

D'autres résultats issus de l'algorithme MCMC permettent de justifier davantage le choix du modèle d'impulsions à amplitude variable par rapport au modèle avec amplitude constante. On constate une variance de bruit estimé ( $\sigma_e^2$ ) moins élevée par rapport au celle estimée par la méthode du chapitre 2

Finalement, le tableau récapitulatif des performances (critère de section 2.3.3) est donné afin de valider la fiabilité de la méthode.

#### 4.4.1 Problème de positivité des amplitudes

Un exemple typique d'impulsion négative est donné dans la figure 4.3. Se référant au potentiel #1 dans la figure 4.3(d), on constate qu'insérer une impulsion négative de valeur absolue faible réduit l'erreur de reconstruction (voir la figure 4.3(a) par rapport à la figure 4.3(b)). On peut donc obtenir parfois une *meilleure* reconstruction en introduisant une impulsion négative, ce qui est physiologiquement impossible.

Le nombre d'impulsions d'amplitudes petites voire négatives est reporté dans le tableau 4.4 au cours des 200 itérations de la chaîne de Markov pour chaque signal EMG testé. Sur une durée de 20 secondes, le nombre total d'impulsions détectées par la référence (toutes unités motrices confondues) est aussi donné à titre d'information. On observe une décroissance rapide des cas d'amplitudes négatives au cours de la chaîne. Mais on constate également que ces amplitudes négatives sont faibles (figure 4.3).

On a choisi de traiter ce problème d'amplitudes négatives en les annulant systématiquement. La détermination d'une loi *a priori* de support positif et favorisant une accumulation autour de la valeur 1, ce qui serait mathématiquement plus satisfaisant, reste un problème ouvert, car il faut chercher, pour l'implémentation, une loi conjuguée par rapport à la vraisemblance (voir l'équation (4.5)).

TAB. 4.3 – Tableau récapitulatif de l'implémentation MCMC pour la décomposition de signal EMG

```

répéter
  pour  $k = 1, \dots, K$  faire %  $K$  segments au total
    % --- étape Metropolis-Hastings -----
     $\mathbf{u} \leftarrow [1_{x_1^{(k)}}, \dots, 1_{x_I^{(k)}}]$ 
    Évaluer  $P(\mathbf{u}^+), \mathbf{u}^+ \in \omega(\mathbf{u})$  selon l'équation (4.6) et (4.7)
     $F_{\mathbf{u}} \leftarrow \sum_{\mathbf{u}^+ \in \omega(\mathbf{u})} P(\mathbf{u}^+)$ 
    Proposer  $\mathbf{u}^* \sim P(\mathbf{u}^+)/F_{\mathbf{u}}, \mathbf{u}^+ \in \omega(\mathbf{u})$ 
     $F_{\mathbf{u}^*} \leftarrow \sum_{\mathbf{u}^+ \in \omega(\mathbf{u}^*)} P(\mathbf{u}^+)$ 
    Accepter  $\mathbf{u}^*$  avec  $\rho = \min \{1, F_{\mathbf{u}}/F_{\mathbf{u}^*}\}$ 
    % ---- échantillonnage des amplitudes -----
     $[s_1^{(k)}, \dots, s_I^{(k)}] \leftarrow \mathbf{0}$ 
    si  $(x_i^{(k)})_i \neq \emptyset$  alors
       $\mathbf{G} \leftarrow [(\mathbf{H}_1^{(k)})_{x_1^{(k)}}, \dots, (\mathbf{H}_I^{(k)})_{x_I^{(k)}}]$ 
       $\mathbf{V} \leftarrow \text{diag}([\sigma_{s_1}^2 \text{ones}(\dim(x_1^{(k)}), 1), \dots, \sigma_{s_I}^2 \text{ones}(\dim(x_I^{(k)}), 1)])$ 
       $\Sigma^{-1} \leftarrow \frac{1}{\sigma_\epsilon^2} \mathbf{G}^t \mathbf{G} + \mathbf{V}^{-1}$ 
       $\mathbf{Q} \leftarrow \text{chol}(\Sigma^{-1})$  % facteur cholesky de  $\Sigma^{-1}$ 
      %  $\mathbf{a}_1 \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}^{(k)}, \Sigma^{(k)})$ , voir l'équation (4.6)
       $\mathbf{a}_1 \leftarrow \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{Q}^t(\mathbf{G}^t \mathbf{z}^{(k)}/\sigma_\epsilon^2 + \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{1}) + \text{randn}(\sum_i \dim(x_i^{(k)}), 1))$ 
       $[(s_1^{(k)})_{x_1^{(k)}}, \dots, (s_I^{(k)})_{x_I^{(k)}}] \leftarrow \mathbf{a}_1$ 
    fin si
  fin pour
  % --- Échantillonner  $P((h_i)_i | \Theta^* \setminus (h_i)_i)$  -----
   $\mathbf{h} = [h_1; \dots; h_I], \mathbf{h} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_{\mathbf{h}}, \Sigma_{\mathbf{h}})$  % voir l'équation (2.9) et (2.8)
  % --- échantillonnage d'échelle -----
  pour  $i = 1, \dots, I$  faire
    Échantillonner  $\gamma_s$  selon l'équation (4.16)
     $(s_i, h_i) \leftarrow (s s_i, h_i/s)$ 
  fin pour
  % ---- Échantillonner  $P((m_i)_i | \Theta^* \setminus (m_i)_i)$  ---
  Pour chaque  $m_i, m_i \sim \mathcal{N}(\bar{m}_i, \bar{\sigma}_i^2)$  % voir l'équation (2.13)
  % ---- Échantillonner  $P((\sigma_i^2)_i | \Theta^* \setminus (\sigma_i^2)_i)$  ----
  Pour chaque  $\sigma_i^2, \sigma_i^2 \sim \text{IG}(\bar{\alpha}_i, \bar{\beta}_i)$  % voir l'équation (2.16)
  % ---- Échantillonner  $P((\sigma_{s_i}^2)_i | \Theta^* \setminus (\sigma_{s_i}^2)_i)$  ---
  Pour chaque  $\sigma_{s_i}^2, \sigma_{s_i}^2 \sim \text{IG}(\alpha_i + \dim(x_i)/2, \beta_i + |(s_i)_{x_i} - 1|^2/2)$ 
  % ---- Échantillonner  $P(\sigma_\epsilon^2 | \Theta^* \setminus \sigma_\epsilon^2)$  ----
   $\sigma_\epsilon^2 \sim \text{IG}(\alpha_s, \beta_s)$  % voir l'équation (2.18)
jusqu'à Convergence

```

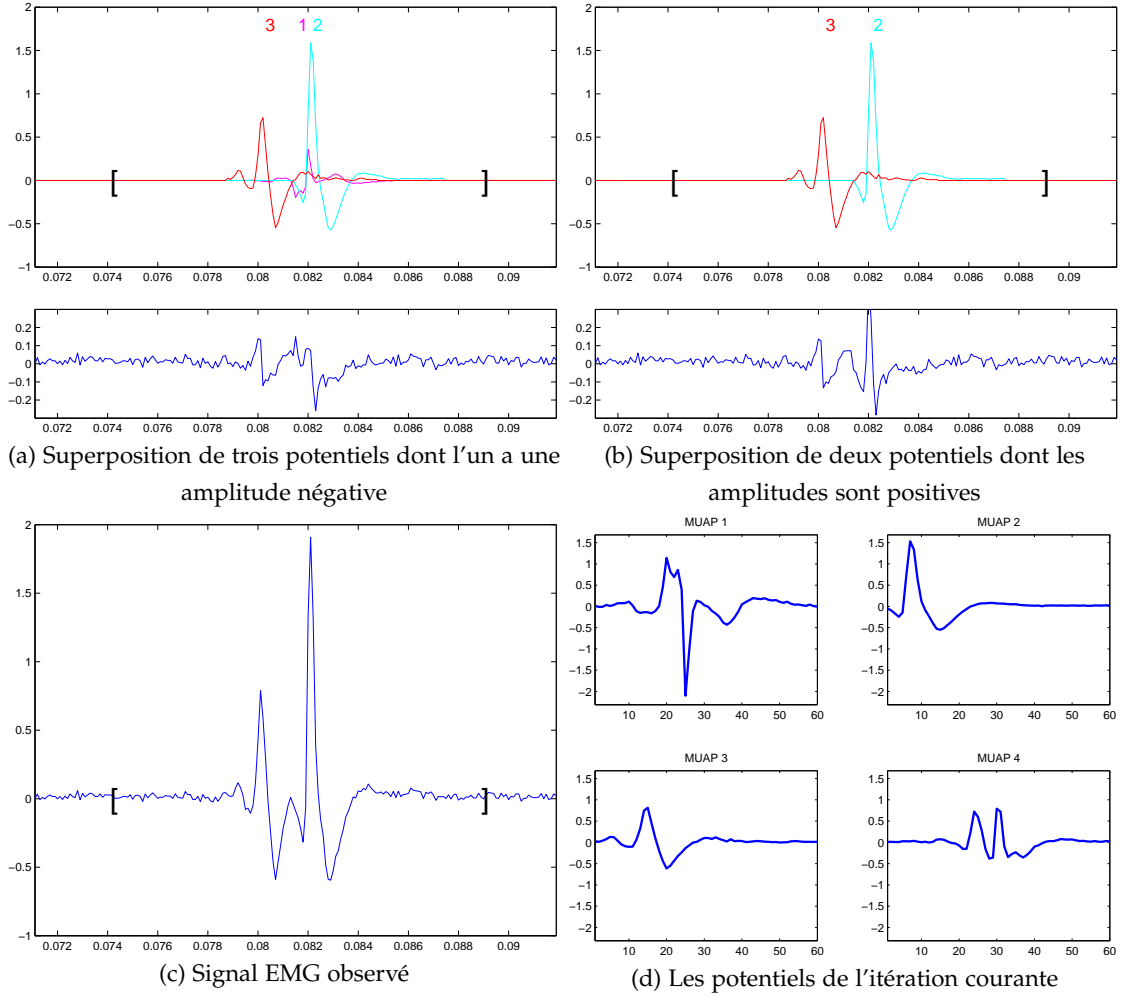


FIG. 4.3 – Exemples d’amplitudes négatives. Dans (a) et (b) sont affichées la reconstruction en tenant compte ou non de l’amplitude négative ainsi que l’erreur résiduelle par rapport aux données. Chaque potentiel est numéroté pour indiquer l’unité motrice correspondante. Dans (c) et (d) sont affichés le signal brut observé et les potentiels de l’itération courante dans la chaîne.

#### 4.4.2 Résultats de la décomposition par MCMC

Les hyperparamètres constants du modèle (voir figure 4.1) et les initialisations des chaînes sont résumés dans le tableau 4.5.  $(h_i^{(0)})_i, \hat{\sigma}_\epsilon$  sont initialisés par les résultats du prétraitement et  $\sigma_h = 0.1 \max(h)$  dans le test.

On affiche d’abord les résultats de la décomposition par MCMC dans le tableau 4.6. La première et deuxième ligne recensent respectivement le nombre d’unités motrices présentes (# UM) et le nombre validé (# Val). Le même critère  $A$  que dans la section 2.3.3 est utilisé. La complexité de l’algorithme est mesurée par le temps de calcul en minutes par itération pour une seconde d’observation de  $z$ . Au niveau de la qualité de décomposition, une nette amélioration est constatée par rapport aux résultats par la méthode de maximisation conjointe (voir tableau 2.5) : plus de sources sont validées (avec la condition  $\sigma_i/m_i < 0.3$ ) et la qualité globale  $A$  de décomposition est meilleure. L’inconvénient majeur de la méthode MCMC est que pour traiter une seconde de signal EMG (soit  $10^4$  échantillons pour une fréquence d’échantillonnage de 10kHz), chaque itération coûte entre 13 et 15 secondes. Afin de tester sur une durée suffisamment longue ( $\approx 20$  secondes par signal) et sur plusieurs signaux enregistrés, la

TAB. 4.4 – Évolution du nombre d'impulsions aberrantes. Le nombre d'impulsions détectées par la méthode de référence est donné pour chaque EMG (durée = 20 secondes, MVC= 10%). Un total de 200 itérations est testé pour l'algorithme MCMC.

Iter	EMG#1 (1135)	EMG#2(1045)	EMG#3(2052)	EMG#4 (1844)	EMG#5 (1089)
#20	1010	832	1665	1251	729
#40	425	355	1068	920	540
#60	400	349	829	1045	498
#80	404	361	1033	936	617
#100	415	358	697	905	488
#120	405	426	864	871	471
#140	398	441	1006	744	503
#160	421	372	1015	785	493
#180	385	399	789	930	487
#200	402	420	795	856	476

TAB. 4.5 – Hyperparamètres constants du modèle bayésien 4.1 et initialisation des chaînes de Markov

$m_0$	$\sigma_0^2$	$\alpha_i$	$\beta_i$	$\alpha_s$	$\beta_s$	$a_s$	$b_s$
100ms	$(30\text{ms})^2$	1	1	1	1	1	1

$m_i$	$\sigma_i^2$	$s_i$	$x_i$	$\sigma_{s_i}^2$	$h_i$	$\sigma_\epsilon$
100ms	$(30\text{ms})^2$	0	$\emptyset$	$(0.15)^2$	$h_i^{(0)}$	$\hat{\sigma}_\epsilon$

chaîne de Markov est arrêtée systématiquement au bout de 200 itérations. L'estimation des trains d'impulsions est ensuite obtenue par vote majoritaire pour chaque instant.

TAB. 4.6 – Résultats de décomposition sur les signaux EMG (MVC= 10%, durée= 20 secondes) par MCMC . La complexité est mesurée en secondes par itération pour chaque seconde de  $z$ .

	EMG#1	EMG#2	EMG#3	EMG#4	EMG#5
# UM	5	5	8	8	4
# Val	5	4	6	5	2
A	91.1%	90.6%	90.5%	89.3%	94.4%
Complexité	13.2	14.9	15.2	13.8	15.0

Ge et Le Carpentier [2009] ont également étudié l'algorithme MCMC appliqué à la modélisation simplifiée, c'est-à-dire sans tenir compte de la variabilité des amplitudes (voir chapitre 1). Cette étude permet de découpler l'amélioration de l'algorithme MCMC par rapport à la recherche Tabou pour la même modélisation d'un signal EMG, et celle apportée par un modèle tenant compte de la variabilité des amplitudes. Le tableau 4.7 [Ge et Le Carpentier 2009] résume les résultats de décomposition des signaux EMG expérimentaux pour les contractions à 10% de la force maximale de contraction volontaire (MVC). La performance est donc de  $88.5 \pm 1.3\%$ . La modélisation des amplitudes gaussiennes permet donc d'obtenir une amélioration en terme du nombre d'unités motrices validées et de la performance  $A$  sur les trains d'impulsions validés.

On note qu'avec la condition  $\sigma_i/m_i < 0.3$ , les trains d'impulsions validés sont déjà considérés comme étant physiologiquement réguliers pour les impulsions neuronales. L'estimation de la variance du bruit est un autre indicateur de la qualité de décom-

TAB. 4.7 – Décomposition des signaux EMG expérimentaux par MCMC (modèle d'amplitudes uniformes)

	MVC = 10%				
	EMG#1	EMG#2	EMG#3	EMG#4	EMG#5
$I$	5	5	8	8	4
$I_{\text{Val}}$	4	4	4	4	2
$A$	87,1%	90,4%	92,3%	89,2%	90,7%

position. Celle-ci permet de mesurer l'écart entre les données observées (signal EMG) et sa reconstruction à partir des trains d'impulsions et leurs RI estimées. En effet, pour chaque itération dans la chaîne de Markov la loi conditionnelle de  $\sigma_\epsilon^2$  suit une loi IG( $\tilde{\alpha}_s, \tilde{\beta}_s$ ) dont la moyenne est d'autant plus faible que  $\|z - \sum_i s_i * h_i\|^2$  est petit (équation (2.18)).

Dans le tableau 4.8, les valeurs de  $\hat{\sigma}_\epsilon^2$  issues du prétraitement sont obtenues sur des portions qui ne contiennent pas de potentiel, et sont considérées comme des valeurs de référence de la variance de bruit pour chaque signal EMG. Les estimations des variances de bruit issues de la méthode par recherche Tabou (chapitre 2) sont généralement plus grandes que celles par MCMC (voir le tableau 4.8). Le résultat est cohérent avec l'amélioration du critère global  $A$  par MCMC et la prise en compte de la variabilité des amplitudes permettant d'ajuster l'énergie de chaque impulsion détectée.

TAB. 4.8 – Comparaison des variances de bruits estimées par les deux méthodes (MVC= 10%, durée= 20 secondes)

	EMG#1	EMG#2	EMG#3	EMG#4	EMG#5
$\hat{\sigma}_\epsilon^2$ prétraitement ( $\times 10^{-4}$ )	12	14	12	19	11
$\hat{\sigma}_\epsilon^2$ recherche Tabou ( $\times 10^{-4}$ )	23	29	30	34	26
$\hat{\sigma}_\epsilon^2$ par MCMC ( $\times 10^{-4}$ )	16	27	24	30	16

#### 4.4.3 Distribution marginale des amplitudes

Enfin, à titre d'information on montre l'histogramme des amplitudes pour chaque unité motrice, obtenues par l'estimateur analytique MMSE conditionnellement à l'estimation des autres paramètres par la méthode MCMC.

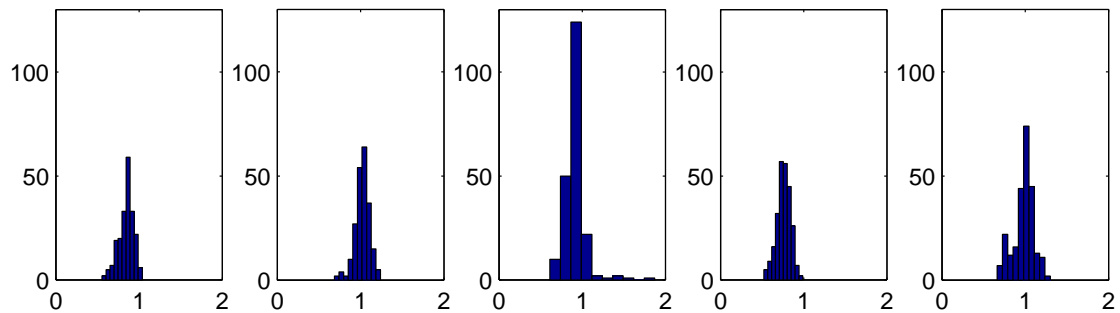


FIG. 4.4 – Histogramme des amplitudes estimées par MMSE pour les impulsions détectées.

## 4.5 CONCLUSION

On a proposé d'abord une modélisation plus complète de signaux EMG en tenant compte de la variabilité des amplitudes de potentiels. Cette variabilité est montrée par les résultats de l'estimation conditionnellement aux impulsions détectées manuellement (méthode de référence). Ensuite, une approche numérique alternative par MCMC est proposée et appliquée à la décomposition de signaux EMG via ce modèle. La motivation de l'approche MCMC se porte à la fois sur le plan pragmatique (moins de paramètres à régler par l'utilisateur) et théorique (preuve de convergence en distribution). Les tests sont lancés sur les mêmes signaux expérimentaux que dans le chapitre 2 (20 secondes en durée et MVC= 10%). On obtient de meilleures qualités de décompositions sur les trains d'impulsions pour le même critère d'une part. D'autre part, le niveau d'erreur résiduelle est également réduit par rapport à l'algorithme déterministe par recherche de *Tabou* sur un modèle de base du chapitre 1.

Outre l'indétermination d'échelle des couples  $(h_i, s_i)_i$ , pour laquelle une étape d'échantillonnage d'échelle est proposée permettant d'ajuster les échelles directement suivant les lois *a priori*, la permutation d'indices des unités motrices dans le cas de potentiels aux formes similaires reste à étudier. Il est connu que dans le contexte de séparation aveugle de sources (BSS), la solution est unique à une transformation près, qui correspond soit à une permutation de sources ou à un changement d'échelle [Moussaoui 2005]. En pratique, l'ambiguïté de permutation d'indices est plus délicate à gérer, sachant qu'elle se traduit par associer la « mauvaise étiquette » lorsque deux formes de potentiels sont suffisamment proches (entraînant donc un faux positif et un faux négatif simultanément) et, *in fine*, migrer les impulsions d'unité motrice à une autre. Il faut cependant noter que le problème traité ici est fortement contraint par la période réfractaire et la régularité pour chaque train, ce qui limite le risque de permutation d'indices. D'autre part, dans le cas de décomposition de signaux EMG multi-capteur, la forme des potentiels associés à une même unité motrice dépend de la position et de l'orientation des capteurs, il est donc peu vraisemblable que deux unités motrices provoquent des potentiels ressemblants dans tous les canaux.

L'autre difficulté concerne la loi *a priori* gaussienne des amplitudes, qui n'est pas limitative sur le support. On doit résoudre le problème lié aux amplitudes aberrantes (souvent négatives) qui apparaissent en cours d'échantillonnage mais n'ont aucune interprétation physiologique. On a adopté la solution *triviale* qui consiste à les supprimer systématiquement. On n'a pas pu trouver une loi *a priori* appropriée pour garantir la positivité de l'amplitude en fixant une moyenne unitaire et laissant varier la variance. Ce problème reste donc ouvert.

Ce travail de thèse a consisté à développer des méthodes numériques de déconvolution impulsionnelle multi-source d'un signal mono-capteur, qui ont été appliquées à la décomposition de signaux électromyographiques.

On a proposé dans un premier temps un modèle direct de convolution discrète entre des processus impulsionnels d'amplitudes constantes et des filtres linéaires, dont la réponse impulsionnelle s'interprète, dans l'application aux EMG, comme un potentiel. La parcimonie des impulsions de chaque source a été prise en compte par un processus de temps d'arrivée, caractérisé à la fois par un temps minimum entre deux impulsions successives (période réfractaire) et une loi gaussienne tronquée. L'objectif de la décomposition est d'estimer à partir d'une seule observation les trains d'impulsions et la réponse impulsionnelle associée à chaque source. On a abouti à un modèle bayésien hiérarchique incluant ces paramètres et des hyperparamètres probabilisés à l'aide de lois *a priori* telles que la détermination de la loi *a posteriori* soit simple. Ceci étant, la loi *a posteriori* ne permet pas d'obtenir d'expression explicite pour les estimateurs bayésiens usuels.

Le problème de décomposition est traité en deux étapes. La première est le pré-traitement inspiré de la littérature McGill [Jul 2002], McGill et al. [Dec 2005] et adapté à un cadre non supervisé, qui fournit le signal EMG après filtrage passe-bande, l'estimation de l'écart type du bruit, la segmentation du signal afin de limiter le support des impulsions par segment utile, et la classification des potentiels isolés permettant de déterminer le nombre de sources et la forme approximative du potentiel associé à chaque source. Le pré-traitement a pour objectif de fournir une initialisation des potentiels ainsi que de réduire la charge numérique en limitant le support de recherche pour la deuxième étape. L'application de deux méthodes de classification (respectivement la méthode bayésienne non-paramétrique [Wood et Black 2008] et la méthode minimisant l'erreur quadratique sur les coefficients de CRDFT [McGill et al. 1985]) ont montré leur pertinence vis-à-vis des potentiels isolés.

La deuxième étape consiste à restaurer les trains d'impulsions dans tous les segments y compris ceux qui contiennent des potentiels superposés. Le problème se résume à la détermination des unités motrices impliquées et des instants d'impulsions de chacune. Pour cela, deux approches numériques ont été présentées.

La première se place dans un cadre déterministe : on cherche à maximiser la loi *a posteriori* (estimateur MAP) itérativement vis-à-vis des inconnus. Pour les variables discrètes (trains d'impulsions), l'algorithme *Tabou* a été choisi. Quant aux variables continues, l'optimisation des densités conditionnelles *a posteriori* est analytique. L'optimisation est améliorée lorsqu'on traite conjointement deux segments suffisamment proches par l'algorithme *Tabou*, car on évite les erreurs de type « label switching ». Cette méthode est complètement non-supervisée et la précision atteint approximativement 90%, comparée aux résultats obtenus par la méthode de référence manuelle,



dans le cas d'un niveau de contraction allant jusqu'à MVC= 10% et d'au plus 8 unités motrices présentes.

La deuxième approche numérique par MCMC est proposée dans l'optique de rendre la décomposition encore plus autonome en se débarrassant du réglage des paramètres liés à l'algorithme *Tabou*. D'autre part, sur le plan théorique, l'approche MCMC fournit une preuve mathématique de convergence asymptotique tandis que l'algorithme *Tabou* reste une méthode heuristique.

Les techniques avancées des méthodes MCMC sont d'abord étudiées et validées dans le cas de déconvolution impulsionnelle mono-source avec un modèle de Bernoulli-Gauss (BG). Ces techniques rassemblent l'étape de Metropolis-Hastings [Labat et Idier 2006] pour traiter le décalage temporel, le rééchantillonnage d'échelle [Veit et al. 2009], et la marginalisation partielle [Ge et al. 2008]. Les deux dernières sont directement appliquées à la décomposition de signaux EMG, avec un modèle bayésien hiérarchique dont les amplitudes d'impulsions sont relaxées et probabilisées par une loi gaussienne non-centrée. La difficulté majeure réside dans l'échantillonnage des trains d'impulsions dans un espace combinatoire, pour lequel l'algorithme de Gibbs se ramènerait à l'évaluation d'un nombre exponentiel de probabilités par itération. Pour contourner ce problème, on a développé une étape « Metropolis-Hastings » garantissant l'ergodicité de la chaîne de Markov sans avoir à explorer tout le domaine combinatoire. Les tests sur les signaux expérimentaux ont montré que l'erreur de reconstruction est moins élevée par rapport à celle obtenue par la méthode déterministe grâce à la modélisation des amplitudes. La précision sur les trains d'impulsions est également meilleure pour un jeu de tests sur 5 signaux EMG avec MVC= 10%. On est néanmoins confronté à un problème d'amplitudes négatives (physiologiquement impossible), parfois estimées par l'algorithme MCMC à cause du support non-restrictif de la loi *a priori* gaussienne.

Plusieurs perspectives s'ouvrent à ce travail. D'abord la résolution temporelle de la détection d'impulsions est limitée par le modèle de convolution discrète. Elle peut être améliorée en incluant une optimisation locale sur l'alignement des potentiels à des instants d'impulsions en dehors de la grille de discrétisation [McGill et Dorfman 1984]. Ensuite, dans la méthode MCMC, dans le même esprit que la technique proposée par Labat et Idier [2006] en vue de mieux centrer la RI dans une fenêtre de longueur fixée, un rééchantillonnage de décalage temporel du couple RI et le train d'impulsions est envisageable.

Les travaux futurs chercheront également à mieux prendre compte dans le modèle de processus de temps d'arrivée des impulsions, la contrainte de positivité des amplitudes, tout en laissant possible le calcul des lois *a posteriori*.

Enfin, le projet de décomposition par l'approche bayésienne est basée sur un modèle mono-capteur de signal EMG. Une extension dans le cas multi-capteur en exploitant les inter-inférences est envisagée dans la suite des travaux. La méthode ne fait pas d'hypothèse ni sur la forme particulière des potentiels pour les unités motrices ni sur leurs propriétés spectrales et peut donc être appliquée aux problèmes de classification/détection des impulsions dans les signaux intraneuraux ou intracorticaux, par exemple.

## ANNEXES

A

## A.1 MÉTHODES DE MONTE CARLO PAR CHAÎNES DE MARKOV

### A.1.1 Principe de Monte Carlo

Les méthodes dites « Monte Carlo » permettent d'estimer les modes et l'espérance parmi d'autres propriétés statistiques d'une distribution d'intérêt  $\pi(x)$ . Ces méthodes sont d'autant plus intéressantes que la dimension de  $x$  augmente, rendant l'estimation de l'espérance et des modes difficile à traiter par les méthodes traditionnelles. Le principe de « Monte Carlo » est le suivant : supposons qu'on dispose d'un grand nombre  $N$  d'échantillons i.i.d.  $\{x_1, \dots, x_N\}$  dans l'espace  $\mathcal{X}$ , chacun distribué suivant la loi cible  $\pi(x)$ , une approximation de cette dernière s'écrit sous la forme :

$$\widehat{\pi}_N(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(x - x_n), \quad (\text{A.1})$$

où  $\delta$  signifie la fonction dirac dans le cas continu et discret. Intuitivement, cette approximation traduit le fait que la répartition d'un grand nombre d'échantillons est représentative de la distribution de  $x$  dans l'ensemble de  $\mathcal{X}$ .

Pour calculer l'espérance d'une fonction  $f$  suivant la distribution  $\pi$  (notée  $S_\pi(f)$ ), on construit l'estimateur en utilisant une suite d'échantillons i.i.d.  $\{x_1, \dots, x_N\}$  distribués suivant  $\pi$  :

$$\widehat{S}_N(f) = \int f(x) \widehat{\pi}_N(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n). \quad (\text{A.2})$$

D'après la loi forte des grands nombres,  $\widehat{S}_N(f)$  converge vers la valeur théorique de  $S_\pi(f)$  pour presque toutes les réalisations de  $\{x_1, \dots, x_N\}$ .

Si de plus on a  $S_\pi(f^2) < \infty$ , on obtient un control de la convergence de l'estimateur d'après le théorème de la limite centrale :

$$\sqrt{N}(\widehat{S}_N(f) - S_\pi(f)) \xrightarrow{\text{en loi}} \mathcal{N}(0, \sigma_f^2), \text{ où } \sigma_f^2 = \text{Var}_\pi(f) \quad (\text{A.3})$$

On note que :

1. la vitesse de la convergence de  $\widehat{S}_N(f)$  ne dépend pas de la dimension de  $x$ , contrairement à la plupart des méthodes déterministes ;
2. une suite d'échantillons est nécessaire pour calculer  $\widehat{S}_N(f)$  pour différentes fonctions de  $f$ .

### A.1.2 Propriétés des chaînes de Markov

On rappelle dans un premier temps la définition d'une chaîne de Markov.

**Définition A.1** (Chaîne de Markov) Une suite  $(X_n)_{n \geq 0}$  de variables aléatoires définies sur le même espace probabilisé  $\mathcal{X}$ , forme une chaîne de Markov (ou un processus de Markov) ssi :

$$P_n(X_n \in A \mid X_{n-1}, \dots, X_0) = P_n(X_n \in A \mid X_{n-1}) \quad (\text{A.4})$$

pour tout ensemble de  $A \subset \mathcal{X}$  mesurable et tout  $n > 1$ . Si de plus les lois de transition (aussi appelé noyau de transition)  $P_n$  n'évoluent pas au cours du temps, c'est-à-dire que la loi  $P_n(X_n \mid X_{n-1})$  ne dépend pas de  $n$ , on appelle la suite  $(X_n)_{n \geq 0}$  une chaîne de Markov homogène.

On s'intéresse plus particulièrement aux chaînes de Markov homogènes  $(X_n)_{n \geq 0}$  dont la loi marginale  $\pi(X_n)$  est invariante par rapport à  $n$  pour  $n$  suffisamment grand (à partir d'un entier  $N_0$ ). Si cette propriété est vraie, on dispose alors d'un ensemble d'échantillons  $(X_n)_{n \geq N_0}$ , distribués suivant la même loi  $\pi$ . Ceci conduit à la définition suivante :

**Définition A.2** ( $\pi$ -invariant) *Une chaîne de Markov homogène  $(X_n)_{n \geq 0}$  régie par le noyau  $P(\cdot|\cdot)$  est dite  $\pi$ -invariante si pour tout  $n$  :*

$$\pi(X_n) = \int P(X_n | X_{n-1}) \pi(X_{n-1}) dX_{n-1} \quad (\text{A.5})$$

Si la relation de Eq. (A.5) est satisfaite,  $\pi$  est dite alors la distribution invariante de la chaîne (ou du noyau  $P$ ). Dans la pratique, il est souvent préférable de vérifier une condition suffisante de  $\pi$ -invariance par sa simplicité :

**Propriété A.1** ( $\pi$ -réversible) *Une chaîne de Markov de noyau  $P(\cdot|\cdot)$  est  $\pi$ -réversible (aussi appelée condition de « detailed balance ») si pour tout couple d'ensemble  $(A, B \subset \mathcal{X})$  :*

$$\int_A P(Y \in B | X) \pi(X) dX = \int_B P(Y \in A | X) \pi(X) dX \quad (\text{A.6})$$

Il est immédiat de démontrer que la  $\pi$ -réversibilité entraîne la  $\pi$ -invariance en prenant  $A = \mathcal{X}$  ou  $B = \mathcal{X}$ . On note que le noyau  $P(\cdot|X)$  est une densité de probabilité étant donné  $X$ . La condition (A.6) revient à vérifier la condition suivante :

$$P(Y | X) \pi(X) = P(X | Y) \pi(Y), \forall X, Y \in \mathcal{X} \quad (\text{A.7})$$

Les noyaux  $P(\cdot|\cdot)$  des algorithmes MCMC sont pratiquement toujours construits de manière à vérifier la propriété de la  $\pi$ -réversibilité vis-à-vis de la distribution d'intérêt.

De plus, si une chaîne de Markov est  $\pi$ -invariante, les échantillons  $(X_n)_{n > 0}$  doivent être les plus indépendantes possible de son état initial  $X_0$  (ou distribution initiale  $\pi_0$ ). Intuitivement, cela implique que la chaîne de Markov est capable d'explorer l'ensemble du support  $\mathcal{X}$  de probabilité non nulle, quelque soit la réalisation de  $x_0 \in \mathcal{X}$ , d'où les deux notions suivantes.

**Définition A.3** (Irréductibilité) *Le temps de retour  $\tau_A$  d'une chaîne de Markov  $(X_n)_{n \geq 0}$  dans un ensemble  $A \subset \mathcal{X}$  est définie par*

$$\tau_A = \arg \min_n \{X_n \in A\}, \quad (\text{A.8})$$

Soit  $\tau_A = +\infty$  si la chaîne n'entre jamais dans  $A$ . La chaîne est dite  $\pi$ -irréductible si pour tout ensemble  $A \subset \mathcal{X}$  et tout  $x_0 \in \mathcal{X}$  :

$$\pi(A) > 0 \implies \Pr(\tau_A < +\infty | X_0 = x_0) > 0. \quad (\text{A.9})$$

Les algorithmes de MCMC, notamment l'échantillonneur de Metropolis-Hastings et Gibbs, vérifient l'irréductibilité de la chaîne pour la distribution d'intérêt  $\pi$ . Cette propriété assure que toutes les régions de probabilité non nulle peuvent être explorées. Toutefois, elle ne garantit pas la fréquence de visite dans une telle région, d'où besoin de la notion de « récurrence » encore plus stricte pour assurer de bonnes propriétés de convergence.

**Définition A.4** (Récurrence) *Une chaîne de Markov  $(X_n)_{n \geq 0}$   $\pi$ -irréductible est récurrente si pour tout ensemble  $A \subset \mathcal{X}$  et tout état initial  $x_0 \in \mathcal{X}$  :*

$$\begin{aligned} \pi(A) > 0 &\implies \Pr((X_n)_{n \geq 0} \in A \text{ infiniment souvent} \mid X_0 = x_0) > 0 \text{ et} \\ \pi(A) > 0, \pi\text{-presque tout } x_0 &\implies \Pr((X_n)_{n \geq 0} \in A \text{ infiniment souvent} \mid X_0 = x_0) = 1 \end{aligned}$$

Des critères de récurrence sont obtenus avec la notion d'ensemble petit, et de condition de dérive Robert [1996][Chapitre 3.3]. Ces connaissances dépassent largement le cadre d'application des méthodes MCMC au problème d'estimation qui fait l'objet de la thèse. On se contente ainsi d'introduire les théorèmes clés sans démonstration dans la suite. Un résultat très important sur la convergence d'une chaîne de Markov est le suivant :

**Théorème A.1** *Si une chaîne de Markov irréductible admet une distribution invariante  $\pi$ , alors  $\pi$  est l'unique distribution invariante de la chaîne et la chaîne est récurrente.*

Il est alors possible d'écrire les premiers résultats de convergence pour l'estimation de la distribution d'intérêt  $\pi$  et l'estimateur du type  $\widehat{S}_N(f)$  de l'espérance  $S_N(f)$  pour les fonctions  $f$   $\pi$ -intégrable :

**Théorème A.2** *Soit une chaîne de Markov irréductible et  $\pi$ -invariante,  $f$  une fonction  $\pi$ -intégrable. Alors pour  $\pi$ -presque tout état initial  $x_0$ ,*

$$\widehat{S}_N(f) \xrightarrow{p.s.} S_N(f) \quad (\text{A.10})$$

où  $\widehat{S}_N(f)$  est un estimateur de l'espérance  $S_N(f)$  construit par une réalisation de la chaîne de Markov  $(x_n)_{n \geq 0}$  selon l'expression (A.2).

Pour obtenir un résultat de convergence plus fort que le théorème A.2 en éliminant d'éventuels comportements périodiques de la chaîne, il est souvent nécessaire de vérifier la condition d'apériodicité.

### A.1.3 Algorithmes de MCMC

L'objectif est de simuler une variable aléatoire  $v$ , dont on connaît la loi cible  $P(v)$ , mais ne dispose pas de générateur. On cherche à générer une chaîne de Markov  $(x^n)_{n \geq 1}$  dont la loi de transition (pour laquelle on dispose d'un générateur) soit telle que la loi de la marginale  $x^n$  tende vers la loi cible, et ce quelque soit l'état initial de la chaîne  $x^1$ .

#### Algorithme de Metropolis-Hastings

On remarque que

1. il suffit de connaître la loi cible  $P(x)$  à une constante multiplicative près ;
2. la loi de proposition (loi instrumentale)  $q(y|x)$  est facile à simuler ;
3. Les premières valeurs générées par l'algorithme ne seront pas utilisées pour l'inférence.

Dans cet algorithme, la loi de transition s'exprime :

$$\begin{aligned} \kappa(x^+, x) &= q(x^+ | x) \rho(x, x^+) + (1 - a(x)) \delta(x^+ - x) \\ \text{où } a(x) &= \int q(x^+ | x) \rho(x, x^+) dx^+. \end{aligned}$$

TAB. A.1 – Algorithme de Metropolis-Hastings

1:	$n \leftarrow 1$ , prendre $x^1$ sur le support de $P(x)$ .
2:	<b>répéter</b>
3:	$n \leftarrow n + 1$
4:	Générer $y^n \sim q(y   x^n)$ ;
5:	Acceptation-Rejet
	$x^{n+1} = \begin{cases} y^n, & \text{avec probabilité } \rho(x^n, y^n) \\ x^n, & \text{sinon} \end{cases}$
	où $\rho(x, y) = \min \left\{ \frac{P(y) q(x   y)}{P(x) q(y   x)}, 1 \right\}$
6:	<b>jusqu'à</b> $n > N$

Et on vérifie que  $\kappa(x^+, x)$  est une distribution car

$$\begin{aligned} \kappa(x^+, x) &\geq 0; \\ \int \kappa(x^+, x) dx^+ &= 1. \end{aligned}$$

De plus, on peut démontrer que le noyau de transition vérifie la propriété de réversibilité en équation (A.6).

Si la loi instrumentale  $q$  vérifie en plus la propriété de symétrie :

$$q(x | y) = q(y | x) \quad (\text{A.11})$$

alors on obtient l'algorithme de *Metropolis*, pour lequel l'expression de  $\rho(x, y)$  se réduit à

$$\rho(x, y) = \min \left\{ \frac{P(y)}{P(x)}, 1 \right\},$$

c'est notamment le cas où l'on peut écrire  $q(x^+ | x) = f(x^+ - x)$ , avec  $f$  paire. Soit on accepte toujours les échantillons  $y^n$  augmentant la loi cible  $P(x)$ .

Dans le cas indépendant de l'algorithme de Metropolis-Hastings, la loi instrumentale devient :

$$q(x^+ | x) = \bar{q}(x^+).$$

et l'algorithme s'écrit : On note néanmoins que les échantillons ainsi générés  $(x^n)_{n \geq 1}$  ne sont pas iid, la suite reste une chaîne de Markov. On peut vérifier que le même critère qui guide le choix d'une loi instrumentale dans la méthode d'acceptation-rejet A.7 :  $\bar{q}$  doit être la plus proche que possible de  $P(x)$ .

**Propriété A.2** Si  $P(x) \leq M\bar{q}(x)$  pour tout  $x$ , alors

$$\left| \int \kappa^n(x, y) \mu(dy) - P(x) \right|_{TV} \leq \left( 1 - \frac{1}{M} \right)^n$$

pour toute loi initiale  $\mu(dy)$ ,  $\kappa^n(x, y)$  est le noyau de la chaîne après  $n$  transitions et  $|\cdot|_{TV}$  désigne la norme de variation totale pour les distributions.

TAB. A.2 – Algorithme de Metropolis-Hastings indépendant

1:  $n \leftarrow 1$ , prendre  $x^1$  sur le support de  $P(x)$ .  
 2: **répéter**  
 3:    $n \leftarrow n + 1$   
 4:   Générer  $y^n \sim \bar{q}(y)$  ;  
 5:   Acceptation-Rejet

$$x^{n+1} = \begin{cases} y^n, & \text{avec probabilité } \rho(x^n, y^n) \\ x^n, & \text{sinon} \end{cases}$$

où  $\rho(x, y) = \min \left\{ \frac{P(y) \bar{q}(x)}{P(x) \bar{q}(y)}, 1 \right\}$

6: **jusqu'à**  $n > N$

### Balayage de variable

Si chaque échantillon de la chaîne  $x^n$  peut être décomposé par :

$$x^n = \begin{bmatrix} x^n(1) \\ \vdots \\ x^n(d) \end{bmatrix}$$

tel qu'il est plus facile d'échantillonner chaque composante  $x^n(i)$  pour tout  $i \in \{1, \dots, d\}$ , en fixant les autres, cela consiste à fabriquer un noyau de transition en tant qu'un produit des noyaux  $\kappa^i$  réversibles, dont chacun s'occupe d'échantillonner la chaîne suivant une direction particulière.

S'y rajoutent dans la liste des variantes, l'algorithme de Metropolis-Hastings avec mise-à-jour au hasard, par permutation circulaire, ou par bloc. Toutes ces spécificités concernent la stratégie à adopter pour balayer l'ensemble de la dimension de  $x^n$ .

### Algorithme de Gibbs

Un cas particulier de l'algorithme de Metropolis-Hastings s'appelle l'algorithme de Gibbs. Doté d'un schéma de mise-à-jour par permutation circulaire, cet algorithme choisit pour chaque loi instrumentale  $q_i$  la loi conditionnelle  $x(i) | x(-i)$  dérivant de la loi cible  $P(x)$ . On vérifie facilement que la probabilité d'acceptation associée  $\rho_i$  vaut toujours 1 pour tout  $i \in \{1, \dots, d\}$ , c'est-à-dire la proposition selon la loi instrumentale est toujours acceptée.

## A.2 ALGORITHME DE LA CLASSIFICATION BAYÉSIENNE NON-PARAMÉTRIQUE

On résume l'approche bayésienne de [Wood et Black 2008] pour la classification des potentiels isolés. Le problème du nombre de classes est traité par une modélisation par un processus de Dirichlet.

Les premiers coefficients issus de PCA représentent environ 73% et 80% (pour  $D = 2$  et  $D = 3$  respectivement) de variance des potentiels collectés. On suppose ensuite que ces coefficients suivent une loi de mélange gaussien multivarié [Wood et Black 2008] :

$$\begin{aligned} c_i | \bar{\pi} &\sim \text{Multinomiale}(\cdot | \bar{\pi}) \\ \mathbf{y}_i | c_i = k, \theta_k &\sim \mathcal{N}(\cdot | \theta_k), \end{aligned} \tag{A.12}$$

où  $\mathbf{c} = (c_i)_{i=1,\dots,N}$  sont les labels de classe, ce dernier est caractérisé par le vecteur de coefficients PCA  $\mathbf{y}_i$  et  $\dim(\mathbf{y}_i) = D$ .  $\theta_k = \{\mu_k, \Sigma_k\}$  sont des paramètres (moyenne et variance) pour chaque distribution gaussienne, et  $\tilde{\pi} = (\pi_k)_k$ ,  $\pi_k = P(c_i = k)$  sont les poids de mélange tels que  $\sum_k \pi_k = 1$ .

Admettons que le nombre de classes  $K$  est connu pour l'instant, les lois *a priori* conjuguées sont choisies pour les paramètres :

$$\begin{array}{lll} \tilde{\pi} & | \alpha & \sim \text{Dirichlet}(\cdot | \frac{\alpha}{K}, \dots, \frac{\alpha}{K}) \\ \Sigma_k & | v_0, \Lambda_0^{-1} & \sim \text{Inverse-Wishart}_{v_0}(\cdot | \Lambda_0^{-1}) \\ \mu_k & | \mu_0, \kappa_0, \Sigma_k & \sim \mathcal{N}(\cdot | \mu_0, \Sigma_k / \kappa_0) \end{array} \quad (\text{A.13})$$

Les hyperparamètres symétriques  $\alpha/K$  de la loi de Dirichlet indique que l'on ne privilégie aucune classe en terme de poids de mélange ;  $\{v_0, \Lambda_0^{-1}, \mu_0, \kappa_0\}$  code les informations *a priori* concernant la forme et la position des distributions gaussiennes.

La distribution *a posteriori* s'écrit donc :

$$\begin{aligned} P(\mathbf{c}, (\theta_k)_k, (\pi_k)_k, \alpha | \mathcal{Y}) \\ \propto P(\mathcal{Y} | \mathbf{c}, (\theta_k)_k) \left( \prod_{k=1}^K P(\mu_k | \Sigma_k) P(\Sigma_k) \right) \left( \prod_{i=1}^N P(c_i | \tilde{\pi}) \right) P(\tilde{\pi} | \alpha) P(\alpha) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

où  $\mathcal{Y} = (\mathbf{y}_i)_i^N$ ,  $N$  étant le nombre de potentiels observés.

La distribution dépend du nombre de classes  $K$ . Une alternative à l'échantillonneur par RJMCMC [Green 1995] consiste à faire tendre  $K$  vers infini tandis que seulement  $N$  observations  $\mathcal{Y}$  sont faites sachant que la distribution dans (A.14) est analytique pour  $K \rightarrow \infty$ . L'application du processus de Dirichlet dans le modèle de mélange est introduite par Neal [2000].

Soit on cherche d'abord à marginaliser les poids de mélange  $\tilde{\pi}$  dans (A.14) :

$$\begin{aligned} P(\mathbf{c} | \alpha) &= \int P(\mathbf{c} | \tilde{\pi}) P(\tilde{\pi} | \alpha) d\tilde{\pi} = \int \left( \prod_{i=1}^N P(c_i | \tilde{\pi}) \right) P(\tilde{\pi} | \alpha) d\tilde{\pi} \\ &= \int \prod_{k=1}^K \pi_k^{m_k} P(\tilde{\pi} | \alpha) d\tilde{\pi} = \frac{\prod_{k=1}^K \Gamma(m_k + \alpha/K)}{\Gamma(\alpha/K)^K} \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(N + \alpha)} \end{aligned}$$

où  $m_k = \sum_{i=1}^N I(c_i = k)$  recense le nombre de potentiels dans la  $k$ -ème classe. La loi de Dirichlet sur  $\tilde{\pi}$  est une loi *a priori* conjuguée de la loi multinomiale  $P(\mathbf{c} | \tilde{\pi})$ . Cette intégration permet d'exprimer la loi *a posteriori* marginalisée  $P(\mathbf{c}, (\theta_k)_k, \alpha | \mathcal{Y})$ , dont on cherche la limite ensuite pour  $K \rightarrow \infty$ .

En appliquant récursivement la relation  $\Gamma(x) = (x-1)\Gamma(x-1)$  pour  $x > 1$ , on obtient

$$P(\mathbf{c} | \alpha) = \left( \frac{\alpha}{K} \right)^{K_+} \left( \prod_{k=1}^{K_+} \prod_{j=1}^{m_k-1} \left( j + \frac{\alpha}{K} \right) \right) \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(N + \alpha)},$$

où  $K_+ \leq K$  désigne le nombre de classes contenant au moins un potentiel. On note que  $K^N$  est le nombre de configurations de  $\mathbf{c}$ , et que la densité pour une configuration particulière de  $\mathbf{c}$  tends vers 0 lorsque  $K \rightarrow \infty$ .

Griffiths et Ghahramani [2005] définit une distribution sur les classes équivalentes de  $\mathbf{c}$ , notées  $[\mathbf{c}]$ , au lieu d'une configuration particulière. En effet, une permutation des labels  $\mathbf{c}$  dans un ensemble de  $K_+$  labels par bijection est considérée comme dans la même classe équivalente de  $\mathbf{c}$  [Griffiths et Ghahramani 2005]. Pour  $K = K_0 + K_+$ , il



s'agit d'allouer  $N$  potentiels dans  $K_+$  classes en laissant  $K_0$  classes vides et il existe  $K!/K_0!$  configurations équivalentes, d'où

$$P([c] | \alpha) = \sum_{c \in [c]} P(c) = \frac{K!}{K_0!} \left( \frac{\alpha}{K} \right)^{K_+} \left( \prod_{k=1}^{K_+} \prod_{j=1}^{m_k-1} \left( j + \frac{\alpha}{K} \right) \right) \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(N + \alpha)}$$

La limite de la distribution s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \lim_{K \rightarrow \infty} P([c] | \alpha) &= \alpha^{K_+} \cdot \frac{K!}{K_0! K^{K_+}} \cdot \left( \prod_{k=1}^{K_+} \prod_{j=1}^{m_k-1} \left( j + \frac{\alpha}{K} \right) \right) \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(N + \alpha)} \\ &= \alpha^{K_+} \cdot \left( \prod_{k=1}^{K_+} (m_k - 1)! \right) \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(N + \alpha)} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Les détails de calcul de limite peuvent être trouvés dans l'annexe de Griffiths et Ghahramani [2005]. En combinant (A.14) et (A.15), on en déduit la loi *a posteriori* marginalisée :

$$P([c], (\theta_k)_k, \alpha | \mathcal{Y}) \propto P(\mathcal{Y} | [c], (\theta_k)_k) \left( \prod_{k=1}^{K_+} P(\mu_k | \Sigma_k) P(\Sigma_k) \right) P([c] | \alpha) P(\alpha).$$

Dans la suite, on notera  $c$  sa classe équivalente  $[c]$  par simplicité. Le processus de restaurant chinois (CRP) permet d'échantillonner la distribution (A.15) du modèle de mélange de gaussiens infinis [Neal 2000]. Soit

$$P(c_i = k | c_{-i}, \alpha) = \begin{cases} \frac{m_{-i,k}}{N-1-\alpha} & m_{-i,k} > 0 \\ \frac{\alpha}{N-1-\alpha} & k = K_{-i,+} + 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

où  $K_{-i,+}$  est le nombre de classes contenant  $m_{-i,k} > 0$  potentiels sans compter  $y_i$ .

Finalement, Wood et Black [2008] a proposé un échantillonneur de Gibbs en marginalisant tous les paramètres  $(\theta_k)_k$ . La loi du label  $c_i$  conditionnellement au reste des paramètres s'écrit :

$$P(c_i = j | c_{-i}, \alpha; \mathcal{Y}) \propto P(\mathcal{Y} | c) P(c | \alpha) \propto P(y_i | \mathcal{Y}^{(j)} \setminus y_i) P(c_i = j | c_{-i}, \alpha), \quad (\text{A.17})$$

où  $\mathcal{Y}^{(j)} \setminus y_i$  est l'ensemble des potentiels sous label  $j$  excepté  $y_i$ . Grâce au choix des lois *a priori* conjuguées, le premier terme s'identifie à une loi de Student multivariée [Gelman et al. 2003] :

$$y_i | \mathcal{Y}^{(j)} \setminus y_i \sim \text{Student}_{v_n - D + 1}(\cdot | \mu_n, \Sigma_n), \quad (\text{A.18})$$

où

$$\begin{aligned} \mu_n &= \frac{\kappa_0}{m_{-i,j} + \kappa_0} \mu_0 + \frac{m_{-i,j}}{m_{-i,j} + \kappa_0} \bar{y} \\ v_n &= v_0 + m_{-i,j} \\ \kappa_n &= \kappa_0 + m_{-i,j} \\ \Sigma_n &= \frac{\kappa_n + 1}{\kappa_n (v_n - D + 1)} \Lambda_n \\ \Lambda_n &= \Lambda_0 + \mathbf{S} + \frac{\kappa_0 m_{-i,j}}{m_{-i,j} + \kappa_0} (\bar{y} - \mu_0)(\bar{y} - \mu_0)^t \end{aligned}$$

et  $D$  désigne la dimension de chaque vecteur  $\mathbf{y}_i$ ,  $\bar{\mathbf{y}}$  la moyenne des  $\mathcal{Y}^{(j)} \setminus \mathbf{y}_i$ , et  $\mathbf{S} = \sum_{\mathbf{y}_l \in \mathcal{Y}^{(j)} \setminus \mathbf{y}_i} (\mathbf{y}_l - \bar{\mathbf{y}})(\mathbf{y}_l - \bar{\mathbf{y}})^t$ . On pourra donc échantillonner séquentiellement suivant la loi conditionnelle (A.17) à l'aide de (A.16) et (A.18), le cas de  $c_i > K_{-i,+}$  est calculé pour  $\mathcal{Y}^{(j)} \setminus \mathbf{y}_i = \emptyset$  dans (A.18). Quant à  $\alpha$ , Wood et Black [2008] a proposé une étape de Metropolis-Hastings dans Gibbs car l'on ne dispose pas de simulateur direct.

Dans le projet de décomposition de signaux EMG, on a appliqué la méthode par échantillonner Gibbs marginalisé de Wood et Black [2008] afin de déterminer le nombre de classes (unités motrices actives) et classifier les potentiels isolés dans la phase de prétraitement. La dimension  $D$  des coefficients PCA est fixée à  $D = 2$  pour réduire la complexité de calcul et de visualisation.

### A.3 LOIS CONDITIONNELLES DU MODÈLE BG

On dérive dans cette partie les lois conditionnelles *a posteriori* afin d'appliquer l'algorithme de Cheng et al. [1996] présenté dans le tableau 3.1.

Pour  $\Theta = \{\mathbf{y} = (\mathbf{q}, \mathbf{x}), \mathbf{h}, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \sigma_h^2\}$ , la loi *a posteriori* jointe s'écrit par l'équation (3.5). On établit d'abord la loi conditionnelle de  $y_i | \Theta \setminus y_i$  comme suit :

$$P(y_i | \Theta \setminus y_i, \mathbf{z}) = P(q_i, x_i | \mathbf{q}_{-i}, \mathbf{x}_{-i}, \mathbf{h}, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z}) \\ \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} |\mathbf{e}_i - \mathbf{H}_i \mathbf{x}_i|^2 \right\} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\epsilon^2 q_i}} \exp \left\{ -\frac{x_i^2}{2\sigma_\epsilon^2 q_i} \right\} \left( \frac{\lambda}{1-\lambda} \right)^{q_i}, \quad (\text{A.19})$$

où  $\mathbf{e}_i = \mathbf{z} - \mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{H}_i \mathbf{x}_i = \mathbf{z} - \mathbf{H}_{-i} \mathbf{x}_{-i}$ , soit l'erreur résiduelle sans la contribution de  $x_i$ ; le terme  $\mathbf{e}_i$  n'est donc pas une fonction de  $x_i$ . Les mêmes notations que dans la section 3.7 sont prises pour  $\mathbf{H}_i, \mathbf{H}_{-i}, x_i, \mathbf{x}_{-i}$ . On note que la loi gaussienne avec une variance nulle exprime en effet la loi  $\delta(x_i)$ , ce qui est conforme au modèle BG.

Ensuite on constate que la variable  $x_i$  est intégrable dans la loi (A.19) tel que :

$$P(q_i | \mathbf{q}_{-i}, \mathbf{x}_{-i}, \mathbf{h}, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z}) = \int_{x_i} P(q_i, x_i | \mathbf{q}_{-i}, \mathbf{x}_{-i}, \mathbf{h}, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z}) dx_i, \quad (\text{A.20})$$

on en déduit que :

$$\begin{cases} P(q_i = 0 | \mathbf{q}_{-i}, \mathbf{x}_{-i}, \mathbf{h}, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z}) & \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} |\mathbf{e}_i|^2 \right\} \\ P(q_i = 1 | \mathbf{q}_{-i}, \mathbf{x}_{-i}, \mathbf{h}, \lambda, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z}) & \propto \frac{\sigma_1}{\sigma_x} \exp \left\{ \frac{\mu_i^2}{\sigma_1^2} \right\} \frac{\lambda}{1-\lambda} \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Pour la première expression, il suffit de prendre  $q_i = 0$  et intégrer  $x_i$  dans (A.19) à l'aide de  $\delta(x_i)$ . Dans l'autre cas, la variable  $x_i$  suit une loi gaussienne dont la variance et la moyenne s'écrivent :

$$\sigma_1^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2 \sigma_x^2}{|\mathbf{h}|^2 + \sigma_\epsilon^2}, \quad \mu_i = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_\epsilon^2} \mathbf{H}_i^t \mathbf{e}_i$$

ce premier terme ne dépend pas de la position  $i$ , il est donc évalué avant l'échantillonnage séquentielle de  $y_i$  (voir tableau 3.1).

La loi marginale de  $q_i$  (dans le couple  $y_i = (q_i, x_i)$ ) conditionnellement aux autres paramètres est donc une loi de Bernoulli  $\text{Bi}(\lambda_i)$ , pour

$$\lambda_i = \tilde{\lambda}_i / (\tilde{\lambda}_i + 1 - \lambda), \quad \tilde{\lambda}_i = \lambda \sigma_1 / \sigma_x \exp(\mu_i^2 / 2\sigma_1^2).$$

Une fois que  $q_i$  est rééchantillonné suivant (A.20), on trouve la loi  $P(x_i | \mathbf{q}, \mathbf{x}_{-i}, \mathbf{h}, \sigma_\epsilon^2, \mathbf{z})$  en fixant la valeur de  $q_i$  échantillonnée. Et l'on obtient  $x_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_1^2)$  si  $q_i = 1$ ,  $x_i = 0$

sinon. Les deux sous-étapes de ① du Tableau 3.1 consistent à échantillonner d'abord  $q_i$  suivant  $P(q_i | \Theta \setminus (q_i, x_i), z)$ , puis  $x_i$  suivant  $P(x_i | \Theta \setminus x_i, z)$ .

La loi conditionnelle de  $P(\mathbf{h} | \Theta \setminus \mathbf{h}, z)$  est obtenue par

$$P(\mathbf{h} | \Theta \setminus \mathbf{h}, z) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_\epsilon^2} |z - \mathbf{X}\mathbf{h}|^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_h^2} |\mathbf{h}|^2 \right\}, \quad (\text{A.22})$$

où  $\mathbf{X}$  représente la matrice Toeplitz de convolution construite par  $\mathbf{x}$ . C'est une loi gaussienne multi-variée  $\mathcal{N}(\mathbf{m}, \mathbf{R})$  dont la variance et la moyenne s'écrivent

$$\mathbf{R} = (\sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{X}^t \mathbf{X} + \sigma_h^{-2} \mathbf{I}_{p+1})^{-1}, \quad \mathbf{m} = \sigma_\epsilon^{-2} \mathbf{R} \mathbf{X}^t z.$$

Par ailleurs, une décomposition de facteur de Cholesky est effectuée sur  $\mathbf{R}^{-1}$  ( $\mathbf{U}^t \mathbf{U} = \mathbf{R}^{-1}$  où  $\mathbf{U}$  est une matrice triangulaire supérieure) dans le tableau 3.1 pour échantillonner  $\mathbf{h}$ . L'opération  $\mathbf{U}^{-1}$  coûte  $\mathcal{O}(N^2)$ .

Les lois conditionnelles des hyperparamètres s'obtiennent directement grâce aux choix des lois *a priori* conjuguées.

## A.4 GROUPE LOCALEMENT COMPACT ET MESURE DE HAAR

On rappelle les deux notions mathématiques nécessaires : *groupe localement compact* et *mesure de Haar* associée.

**Définition A.5** Un groupe est un ensemble  $\mathbf{A}$  muni d'un opérateur «  $\cdot$  » tel que :

- a) pour tout  $a, a' \in \mathbf{A}$ ,  $a \cdot a' \in \mathbf{A}$  ;
  - b) il existe un élément neutre  $e \in \mathbf{A}$ , tel que  $e \cdot a = a \cdot e = a$ , pour tout  $a \in \mathbf{A}$  ;
  - c) pour tout  $a \in \mathbf{A}$ , il existe un élément  $a^{-1} \in \mathbf{A}$ , appelé inverse de  $a$ , tel que  $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$ .
- Si de plus, l'opérateur «  $\cdot$  » est commutatif (c'est-à-dire  $a \cdot a' = a' \cdot a$  pour tout  $a, a' \in \mathbf{A}$ ),  $\{\mathbf{A}, \cdot\}$  est alors un groupe abélien (en l'honneur de Niels Abel).

Supposons dans la suite que pour un ensemble de transformation  $\{\gamma_a | \gamma_a(\mathbf{w}) \in \mathbf{W}\}$ , son opérateur «  $\cdot$  » est défini par  $(\gamma_a \cdot \gamma_b)(\mathbf{w}) = \gamma_a(\gamma_b(\mathbf{w}))$ .

**Exemple A.1** 1. Un groupe de translation défini par  $\{\gamma_a | \gamma_a(\mathbf{w}) = \mathbf{w} + a, a \in \mathbf{R}^n\}$  vérifie toutes les conditions d'un groupe abélien, pour lequel,  $e = \gamma_0$  et  $\gamma_a^{-1} = \gamma_{-a}$ .  
 2. Pour un groupe d'échelle  $\{\gamma_a | \gamma_a(\mathbf{w}) = a\mathbf{w}, a \in \mathbf{R}^+\}$ , l'élément neutre  $e = \gamma_1$  et  $\gamma_a^{-1} = \gamma_{1/a}$ . C'est également un groupe abélien de par la commutativité de multiplication scalaire dans  $\mathbf{R}^+$ .

**Définition A.6** On appelle  $\{\mathbf{A}, \cdot\}$  un groupe localement compact, si

- a)  $\mathbf{A}$  est un espace métrique localement compact ;
- b) les opérations  $(a, b) \rightarrow a \cdot b$  et  $a \rightarrow a^{-1}$  sont continues.

Si de plus, les deux opérations sont analytiques (c'est-à-dire dans  $C^\infty$ , infiniment continûment dérivable), alors  $\{\mathbf{A}, \cdot\}$  est un groupe de Lie

**Remarque A.1** Un groupe  $\{\mathbf{A}, \cdot\}$  est automatiquement un groupe localement compact s'il est fini, soit  $\dim \mathbf{A} < \infty$ .

L'intérêt de la notion du groupe localement compact est qu'un tel groupe possède une mesure, appelée la *mesure de Haar*, permettant la définition d'intégrale sur  $\mathbf{A}$ , une étape mathématique préalable pour probabiliser l'espace  $\mathbf{A}$ .

**Définition A.7** Pour tout sous-ensemble  $B \subseteq \mathbf{A}$ , et tout élément  $a \in \mathbf{A}$ ,  $B \cdot a$  désigne un autre sous-ensemble de  $\mathbf{A}$  résultant de chaque élément dans  $B$  régi sur  $a$  par l'opérateur «  $\cdot$  », soit  $B \cdot a = \{b \cdot a \mid b \in B\}$ . Une mesure  $H(da)$  sur un groupe localement compact  $\mathbf{A}$  est appelée mesure de Haar à droite si elle est invariante par une opération  $B \cdot a$  pour tout  $B \subseteq \mathbf{A}$  :

$$H(B) = H(B \cdot a), \quad \forall a \in \mathbf{A} \quad (\text{A.23})$$

Une mesure de Haar à gauche est définie de façon symétrique.

La notion de la mesure de Haar a été introduite par Alfréd Haar en 1933, ainsi que la démonstration de son existence. Rao [1987] a montré que la mesure de Haar à droite est la même que celle à gauche quand  $\{\mathbf{A}, \cdot\}$  est compact ou abélien.

**Exemple A.2** 1. le groupe de translation et celui d'échelle sont des groupes localement compacts car les espaces  $\mathbf{R}^n$  et  $\mathbf{R}^+$  sont localement compacts, et les opérations  $a \cdot b$ ,  $a^{-1}$  sont analytiques.  
 2. La mesure de Haar pour le groupe de translation est la mesure de Lebesgue; et  $H(da) = |a|^{-1}da$  pour le groupe d'échelle.  
 3. Si  $\{\mathbf{A}, \cdot\}$  est un groupe compact,  $H(da)$  est la mesure de probabilité uniforme.

## A.5 LEMME D'INVERSION MATRICIELLE

Aussi appelé « Woodbury matrix identity », ce lemme permet d'inverser  $\mathbf{A} + \mathbf{BCD}$  où  $\mathbf{A}$  est  $n$ -par- $n$ ,  $\mathbf{B}$  est  $n$ -par- $k$ ,  $\mathbf{C}$  est  $k$ -par- $k$  et  $\mathbf{D}$  est  $k$ -par- $n$  par l'inversion des matrices de rang- $k$ , si  $\mathbf{A}^{-1}$  est déjà connue. Soit,

$$(\mathbf{A} + \mathbf{BCD})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{DA}^{-1}\mathbf{B})^{-1}\mathbf{DA}^{-1} \quad (\text{A.24})$$

Dans le cas particulier de  $k = 1$ , cette formule se réduit à la formule de « Sherman Morrison ».

Un autre résultat important s'écrit sous la forme d'inversion d'une matrice partitionnée, soit

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{D} & \mathbf{C} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{C} - \mathbf{DA}^{-1}\mathbf{B})^{-1}\mathbf{DA}^{-1} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{C} - \mathbf{DA}^{-1}\mathbf{B})^{-1} \\ -(\mathbf{C} - \mathbf{DA}^{-1}\mathbf{B})^{-1}\mathbf{DA}^{-1} & (\mathbf{C} - \mathbf{DA}^{-1}\mathbf{B})^{-1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.25})$$

pour les matrices  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$  de mêmes tailles que ci-dessus.

## A.6 MISE-À-JOUR DE FACTEUR DE CHOLESKY (SUPPRESSION D'UN PIC)

Soit le problème de la MAJ du facteur de Cholesky pour la suppression du  $i$ -ème pic telle que  $\mathbf{K}^t\mathbf{K} = \mathbf{R}^t\mathbf{R} - \mathbf{v}\mathbf{v}^t$ . Les matrices concernées s'écrivent de la manière suivante :

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{b} & \mathbf{C} \\ 0 & \delta & \mathbf{e}^t \\ 0 & 0 & \mathbf{F} \end{bmatrix}, \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{G} & 0 & \mathbf{H} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{J} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.26})$$

$$\begin{cases} \mathbf{v} &= \sqrt{\tau}\mathbf{R}^t \cdot [\mathbf{b}^t \quad \delta \quad 0]^t \\ \tau^{-1} &= \mathbf{b}^t\mathbf{b} + \delta^2 \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

où  $\{\mathbf{A}, \mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{J}\}$  sont triangulaires supérieures et  $\delta = \mathbf{R}_{i,i}$  la  $i$ -ième composante diagonale de  $\mathbf{R}$ .

$$\mathbf{K}_{-i,-i} = \begin{bmatrix} \mathbf{G} & \mathbf{H} \\ 0 & \mathbf{J} \end{bmatrix}$$

est le facteur de Cholesky que l'on souhaite obtenir à partir de  $\mathbf{R}$ .

De premier vu, la solution simple consisterait à calculer  $\mathbf{v}$ , déduire  $\mathbf{K}$  par une MAJ du facteur de Cholesky (*downdate* en rang-1), et soustraire la  $i$ -ème ligne et colonne pour trouver le facteur de Cholesky (de dimension réduite). Malheureusement, cette méthode plante systématiquement parce que  $\mathbf{K}^t \mathbf{K}$  n'est plus définie positive. Selon Seeger [2008], une condition nécessaire et suffisante pour réussir l'opération de *downdate* en rang-1 (ou *update* par soustraction de  $\mathbf{v}\mathbf{v}^t$ ) est que  $\rho^2 = 1 - \mathbf{p}^t \mathbf{p} > 0$  pour lequel  $\mathbf{p}$  est défini par

$$\mathbf{R}^t \mathbf{p} = \mathbf{v}. \quad (\text{A.28})$$

Sans invertir  $\mathbf{R}^t$  dans l'expression, on déduit de l'équation (A.27) que  $\mathbf{p} = \sqrt{\tau} [\mathbf{b}^t \quad \delta \quad 0]^t$  et donc  $\rho^2 = 0$ . L'algorithme de *Cholupdate* par une série de rotation de *Givens* ne peut pas marcher Seeger [2008].

Ce problème est contourné par une stratégie qui d'abord réduit la dimension et puis procède l'algorithme de *Cholupdate*. De l'équation (A.26), on obtient :

$$\mathbf{R}^t \mathbf{R} = \left[ \begin{array}{c|c|c} \mathbf{A}^t \mathbf{A} & \mathbf{A}^t \mathbf{b} & \mathbf{A}^t \mathbf{C} \\ \hline \mathbf{b}^t \mathbf{A} & \tau^{-1} & \mathbf{b}^t \mathbf{C} + \delta \mathbf{e}^t \\ \hline \mathbf{C}^t \mathbf{A} & \mathbf{C}^t \mathbf{b} + \delta \mathbf{e} & \mathbf{C}^t \mathbf{C} + \mathbf{e} \mathbf{e}^t + \mathbf{F}^t \mathbf{F} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c|c|c} \mathbf{G}^t \mathbf{G} & 0 & \mathbf{G}^t \mathbf{H} \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ \hline \mathbf{H}^t \mathbf{G} & 0 & \mathbf{H}^t \mathbf{H} + \mathbf{J}^t \mathbf{J} \end{array} \right] + \mathbf{v} \mathbf{v}^t$$

Les sous-matrices en éliminant la  $i$ -ème ligne et colonne s'écrivent :

$$\left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{A}^t \mathbf{A} & \mathbf{A}^t \mathbf{C} \\ \hline \mathbf{C}^t \mathbf{A} & \mathbf{C}^t \mathbf{C} + \mathbf{e} \mathbf{e}^t + \mathbf{F}^t \mathbf{F} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{G}^t \mathbf{G} & \mathbf{G}^t \mathbf{H} \\ \hline \mathbf{H}^t \mathbf{G} & \mathbf{H}^t \mathbf{H} + \mathbf{J}^t \mathbf{J} \end{array} \right] + \mathbf{v}_{-i} \mathbf{v}_{-i}^t$$

où  $\mathbf{v}_{-i}$  désigne le vecteur  $\mathbf{v}$  sans la  $i$ -ème composante. La relation suivante est essentielle à l'algorithme que l'on propose :

$$\left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbf{C} \\ \hline 0 & \mathbf{F} \end{array} \right]^t \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbf{C} \\ \hline 0 & \mathbf{F} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} 0 \\ \mathbf{e} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} 0 \\ \mathbf{e} \end{array} \right]^t = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{G} & \mathbf{H} \\ \hline 0 & \mathbf{J} \end{array} \right]^t \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{G} & \mathbf{H} \\ \hline 0 & \mathbf{J} \end{array} \right] + \mathbf{v}_{-i} \mathbf{v}_{-i}^t \quad (\text{A.29})$$

Les deux étapes pour une remise à jour dans le cas de la suppression d'un pic sont :

1. une *update* sur  $\mathbf{F}$  (de dimension réduite) :

$$\mathbf{M} = \text{Cholupdate}(\mathbf{F}, \mathbf{e}, ' +');$$

2. une *downdate* qui conserve la positivité du produit et n'induit donc pas d'erreur numérique :

$$\left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{G} & \mathbf{H} \\ \hline 0 & \mathbf{J} \end{array} \right] = \text{Cholupdate}\left(\left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbf{C} \\ \hline 0 & \mathbf{M} \end{array} \right], \mathbf{v}_{-i}, ' -'\right).$$

On peut démontrer que  $\rho^2 = 1 - \mathbf{q}^t \mathbf{q}$  est strictement positive pour

$$\left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbf{C} \\ \hline 0 & \mathbf{M} \end{array} \right]^t \mathbf{q} = \mathbf{v}_{-i} = \sqrt{\tau} \left[ \begin{array}{c} \mathbf{A}^t \mathbf{b} \\ \mathbf{C}^t \mathbf{b} + \delta \mathbf{e} \end{array} \right]. \quad (\text{A.30})$$

On en déduit que :

$$q = \sqrt{\tau} \begin{bmatrix} b \\ \delta \mathbf{M}^{-t} e \end{bmatrix}, \quad (\text{A.31})$$

et  $q^t q = \tau(b^2 + \delta^2 e^t (\mathbf{M}^t \mathbf{M})^{-1} e)$ . Or on a la relation suivante (voir la première étape de MAJ)

$$\mathbf{M}^t \mathbf{M} = e e^t + \mathbf{F}^t \mathbf{F} > e e^t,$$

ce qui permet de déduire que  $e^t (\mathbf{M}^t \mathbf{M})^{-1} e < 1$ , d'où l'inégalité  $q^t q < 1$ . Donc l'algorithme de *downdate* peut se dérouler correctement. Ceci est cohérent avec le fait que le produit  $\mathbf{K}_{-i,-i}^t \mathbf{K}_{-i,-i}$  reste définie positive (par construction) alors qu'il est évident que  $\mathbf{K}^t \mathbf{K}$  ne l'est pas.

## A.7 LA MÉTHODE DE REJET

**but**

La méthode de rejet est utilisée pour échantillonner indirectement une variable aléatoire  $X$ , de densité de probabilité  $P(x)$ , lorsqu'on ne sait pas simuler directement cette loi. La méthode de rejet est généralement utilisée dans les cas où la forme de  $P(x)$  rend difficile l'échantillonnage direct.

On échantillonne suivant une distribution instrumentale  $g(x)$ , sous la seule condition que  $P(x) < M g(x)$ ,  $M > 1$  sur l'ensemble de support de  $X$ . Au lieu d'échantillonner directement la distribution  $P(x)$ , on utilise une distribution enveloppe  $M g(x)$  pour laquelle l'échantillonnage est plus facile. Ces échantillons de la loi  $g(x)$  sont acceptés ou rejetés avec probabilité (voir tableau A.3).

La probabilité d'acceptation est la proportion des échantillons acceptés, exprimée par

$$Pr(u < f(x)/Mg(x)) = E[f(x)/Mg(x)] = \int \frac{f(x)}{Mg(x)} g(x) dx = \frac{1}{M} \int f(x) dx = \frac{1}{M}. \quad (\text{A.32})$$

Plus  $M$  est faible, moins les échantillons sont rejetés, et le nombre requis d'échantillons pour simuler la distribution cible est atteint plus rapidement. Car  $M$  doit être supérieur à  $\max\{f(x)/g(x)\}$  pour que  $P(x) < M g(x)$ ,  $\forall x$ , et cette probabilité d'acceptation atteint son maximum quand  $f(x) = g(x)$ .

### algorithme d'échantillonnage

On suppose

- qu'il existe une autre densité de probabilité  $g(x)$  telle que le ratio  $f/g$  soit borné, disons par  $M$ ,
- qu'on sache simuler  $Y$  de densité  $g$ .

La version basique de la méthode de rejet prend la forme suivante :

TAB. A.3 – Algorithme de la méthode de rejet

```

1: répéter
2:   Tirer  $X$  de densité  $g(x)$  ;
3:   Tirer  $U$  selon la loi uniforme  $U(0,1)$ , indépendamment de  $X$  ;
4:   jusqu'à  $U \leq \frac{P(X)}{Mg(X)}$  ;
5:   Accepter  $X$  comme un tirage aléatoire de densité de probabilité  $P(x)$ .

```

### A.7.1 la méthode de ratio

La méthode de ratio s'inscrit dans le cadre d'échantillonnage par rejet. Soit  $P(x)$  la densité de probabilité à échantillonner, et l'on suppose que  $h(x) \propto P(x)$ . On considère l'ensemble  $S_h$  suivant :

$$S_h = \{(u, v) \mid 0 \leq u \leq \sqrt{h(v/u)}\},$$

et le théorème suivant :

**Théorème A.3** Si  $k_u = \sup_x \sqrt{h(x)}$  et  $k_v = \sup_x |x| \sqrt{h(x)}$ , alors

- $S_h$  est inclus dans la rectangle  $(0, k_u; -k_v, k_v)$  ;
- si de plus,  $h(x) = 0, x < 0$  (support positif),  $S_h \subset (0, k_u; 0, k_v)$  ;
- soit le couple  $(U, V)$  échantillonné uniformément dans la rectangle  $(0, k_u; -k_v, k_v)$  (ou  $(0, k_u; 0, k_v)$ ), si  $(U, V) \in S_h$ , alors  $X = V/U$  est distribué suivant  $P(x)$ .

Le théorème conduit à l'algorithme de ratio :

TAB. A.4 – Algorithme de la méthode de ratio

```

1: Évaluer  $k_u = \sup_x \sqrt{h(x)}$  et  $k_v = \sup_x |x| \sqrt{h(x)}$  ;
2: répéter
3:   Tirer  $(U, V)$  uniformément dans la rectangle  $(0, k_u; 0, k_v)$  ;
4:    $X \leftarrow V/U$  ;
5:   jusqu'à  $U < \sqrt{h(X)}$  ;
6:   Accepter  $X$  comme un tirage aléatoire de densité de probabilité  $P(x)$ .

```

### A.7.2 Application à la simulation de la loi GIG

La loi à échantillonner s'écrit :

$$f_{\text{GIG}}(x; \lambda, \alpha, \beta) = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{\lambda/2} \frac{x^{\lambda-1}}{2K_\lambda(\sqrt{\alpha\beta})} \exp\left(-\frac{1}{2}(\beta x^{-1} + \alpha x)\right), x > 0$$

Soit

$$h(x) = x^{\lambda-1} \exp\left(-\frac{1}{2}(\beta x^{-1} + \alpha x)\right) \propto f_{\text{GIG}}(x).$$

et l'on vérifie que le support de  $h(x)$  permet de restreindre le rectangle dans  $(0, k_u; 0, k_v)$ .

Pour  $\alpha \neq 0$ , les modes de  $\sqrt{h(x)}$  et  $|x|\sqrt{h(x)}$  se trouvent donc à

$$x_m = \arg \max_x \sqrt{h(x)} = \frac{\lambda - 1 + \sqrt{(\lambda - 1)^2 + \alpha\beta}}{\alpha};$$

$$y_m = \arg \max_x |x|\sqrt{h(x)} = \frac{\lambda + 1 + \sqrt{(\lambda + 1)^2 + \alpha\beta}}{\alpha}.$$

On peut alors trouver les expressions analytiques de  $k_u$  et  $k_v$  et appliquer l'algorithme de ratio en A.4. On note que pour le cas  $\alpha = 0$ , la distribution  $f_{\text{GIG}}(x)$  s'identifie à la distribution de gamma inverse :

$$f_{\text{IG}}(x; a, b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} (1/x)^{a+1} \exp(-b/x).$$

pour  $a = -\lambda$  et  $b = \beta/2$ .

### A.7.3 Application à la simulation d'échantillonnage d'échelle

Dans le cadre de rééchantillonnage d'échelle dont les lois a priori sont gaussiennes non-centrées, on est confronté au problème de simuler une loi de forme :

$$h(x; \lambda, a, b, c, d) \propto x^{\lambda-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left( ax^2 + bx + \frac{c}{x} + \frac{d}{x^2} \right) \right\}, \quad (\text{A.33})$$

pour  $a, d > 0$  et  $x > 0$ .

Quelque soit  $\lambda$ , si  $a, d > 0$ , on a

$$\begin{cases} 0 < h(x) < +\infty, x > 0 \\ \lim_{x \rightarrow 0^+} h(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} h(x) = 0. \end{cases}$$

Il existe donc un maximum dans l'intervalle  $(0, +\infty)$ . Pour trouver les modes de  $\sqrt{h(x; \lambda, a, b, c, d)}$  et de  $|y|\sqrt{h(y; \lambda, a, b, c, d)}$ , il suffit de calculer les racines  $x_m$  (et  $y_m$ ) des polynômes déduits de  $h(x; \lambda, a, b, c, d)' = 0$  (et  $h(y; \lambda + 2, a, b, c, d)' = 0$  respectivement). Soit respectivement

$$\begin{cases} ax_m^4 + \frac{b}{2}x_m^3 - (\lambda - 1)x_m^2 - \frac{c}{2}x_m - d = 0, \\ ay_m^4 + \frac{b}{2}y_m^3 - (\lambda + 1)y_m^2 - \frac{c}{2}y_m - d = 0. \end{cases} \quad (\text{A.34})$$

On note que  $a, d \in \mathbf{R}^+$ , et que par conséquent le produit des 4 racines vaut  $-d/a < 0$ , c'est-à-dire le cas de 2 paires de racines complexes et conjuguées est impossible car leur produit sera positif. On distingue les cas suivants concernant les racines :

1. s'il existe un seul pair de racines complexes conjuguées, les deux autres portent les signes inverses, dont une dans l'intervalle  $(0, +\infty)$ ;
2. si les quatre racines sont réelles, la combinaison des signes est soit  $(-, -, -, +)$ , soit  $(-, +, +, +)$ .

Dans tous les cas, il existe au moins une solution réelle positive qui correspond aux extrema des équations (A.34). On propose donc de

1. résoudre numériquement les équations polynômiales en (A.34);
2. trier les solutions réelles positives parmi toutes les solutions;
3. trouver  $k_u$  et  $k_v$  en maximisant  $\sqrt{h(x_m; \lambda, a, b, c, d)}$  et  $|y_m|\sqrt{h(y_m; \lambda, a, b, c, d)}$  respectivement;
4. appliquer l'algorithme de ratio en A.4.





# BIBLIOGRAPHIE

- F. A. Atiya. Recognition of multiunit neural signals. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, 39 : 723–729, Jul 1992. (Cité page 5.)
- S. Bourguignon et H. Carfantan. Bernoulli-Gaussian spectral analysis of unevenly spaced astrophysical data. Dans *IEEE Workshop Stat. Sig. Proc.*, pages 811–816, Bordeaux, France, Juillet 2005. (Cité pages 36, 46 et 47.)
- S. P. Brooks et A. Gelman. General methods for monitoring convergence of iterative simulations. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 7(4) :434–455, 1998. (Cité pages 36, 56, 57 et 60.)
- O. Cappé, A. Doucet, M. Lavielle, et E. Moulines. Simulation-based methods for blind maximum-likelihood filter identification. *Signal processing*, 73(1-2) :3–25, Février 1999. (Cité page 51.)
- F. Champagnat, Y. Goussard, et J. Idier. Unsupervised deconvolution of sparse spike trains using stochastic approximation. *IEEE Trans. signal processing*, 44(12) :2988–2998, Décembre 1996. (Cité pages 35, 37, 51, 53 et 54.)
- Q. Cheng, R. Chen, et Ta-Hsin Li. Simultaneous wavelet estimation and deconvolution of reflection seismic signals. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 34 : 377–384, Mars 1996. (Cité pages ix, 35, 36, 37, 38, 39 et 87.)
- J. Dagpunar. *Principles of Random Variate Generation*. Clarendon, Oxford, 1988. (Cité page 70.)
- C. J. De Luca. Physiology and mathematics of myoelectric signals. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, BME-26(6) :313–325, Jun 1979. (Cité pages 8 et 9.)
- C. J. De Luca et R. Merletti. Surface myoelectric signal cross-talk among muscles of the leg. *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, 69(6) :568 – 575, 1988. ISSN 0013-4694. (Cité page 4.)
- V. Dietz, E. Bischofberger, C. Wita, et H. J. Freund. Correlation between the discharges of two simultaneously recorded motor units and physiological tremor. *Electroencephalogr. Clin. Neurophysiol.*, 40 :97–105, Jan 1976. (Cité page 9.)
- N. Dobigeon, Jean-Yves Tournet, et J. D. Scargle. Joint segmentation of multivariate astronomical times series : Bayesian sampling with a hierarchical model. *IEEE Trans. signal processing*, 55(2) :414–423, Février 2007a. (Cité page 51.)
- Nicolas Dobigeon, Jean-Yves Tournet, et Manuel Davy. Joint segmentation of piecewise constant autoregressive processes by using a hierarchical model and a bayesian sampling approach. *IEEE Trans. signal processing*, 55(4) :1251–1263, April 2007b. (Cité page 51.)

- D. Farina, C. Cescon, F. Negro, et R. M. Enoka. Amplitude cancellation of motor-unit action potentials in the surface electromyogram can be estimated with spike-triggered averaging. *J. Neurophysiol.*, 100(1) :431–440, Jul 2008. (Cité page 33.)
- D. Farina, A. Crosetti, et R. Merletti. A model for the generation of synthetic intramuscular EMG signals to test decomposition algorithms. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, 48(1) : 66–77, Jan 2001. ISSN 0018-9294. (Cité pages 11, 26 et 35.)
- M. S. Fee, P. P. Mitra, et D. Kleinfeld. Automatic sorting of multiple unit neuronal signals in the presence of anisotropic and non-gaussian variability. *J. Neurosci. Methods*, 69(2) :175 – 188, 1996. (Cité pages 5 et 7.)
- T. A. Feo et M. G. C. Resende. Greedy randomized adaptive search procedures. *J. of Global Optimization*, 6(2) :109–133, Mar 1995. ISSN 0925-5001. (Cité page 1.)
- D. Ge, J. Idier, et E. Le Carpentier. A new MCMC algorithm for blind Bernoulli-Gaussian deconvolution. Dans *EUSIPCO*, Lausanne, Suisse, Septembre 2008. (Cité pages 36, 52 et 78.)
- D. Ge et E. Le Carpentier. MCMC pour la décomposition automatique de signal EMG. Dans *GRETSI*, Dijon, France, Sep 2009. (Cité pages 65 et 74.)
- D. Ge, E. Le Carpentier, et D. Farina. Unsupervised Bayesian Decomposition of Multi-Unit EMG Recordings using Tabu Search. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, 2009. à paraître. (Cité page 11.)
- A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, et D. B. Rubin. *Bayesian Data Analysis*. London : Chapman and Hall., 1995. (Cité pages 2 et 61.)
- A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, et D. B. Rubin. *Bayesian Data Analysis, Second Edition (Texts in Statistical Science)*. Chapman & Hall/CRC, 2 édition, July 2003. (Cité page 86.)
- S. Geman et D. Geman. Stochastic relaxation, Gibbs distributions and the Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. Pattern Anal Mach Intell.*, 6 :721–741, Nov 1984. (Cité page 1.)
- F. Glover. Tabu search - part I. *ORSA Journal on Computing*, 1 :190–206, 1989. (Cité pages 1, 18 et 22.)
- D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., Boston, MA, USA, 1989. (Cité page 1.)
- P. J. Green. Reversible jump MCMC computation and Bayesian model determination. *Biometrika*, 82 :711–732, 1995. (Cité pages 67 et 85.)
- Thomas L. Griffiths et Zoubin Ghahramani. Infinite latent feature models and the indian buffet process. Dans *In NIPS*, pages 475–482. MIT Press, 2005. (Cité pages 85 et 86.)
- R. Gut et G. S. Moschytz. High-precision EMG signal decomposition using communication techniques. *IEEE Trans. Signal Processing*, 48(9) :2487–2494, Sep 2000. (Cité page 18.)

- A. L. Hodgkin et A. F. Huxley. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *J Physiol*, 117(4) :500–544, Aug. 1952. (Cité page 9.)
- N. Jiang, K. B. Englehart, et P. A. Parker. A simulation method for the firing sequences of motor units. *Journal of Electromyography and Kinesiology*, 17(5) :527 – 534, 2007. (Cité page 9.)
- G. Kail, F. Hlawatsch, et C. Novak. Efficient Bayesian detection of multiple events with a minimum-distance constraint. Dans *IEEE/SP 15th Workshop on Statistical Signal Processing, 2009. SSP '09.*, Cardiff, UK, Août 2009a. (Cité pages 61 et 62.)
- G. Kail, C. Novak, B. Hofer, et F. Hlawatsch. A blind Monte Carlo detection-estimation method for optical coherence tomography. Dans *ICASSP*, pages 493–496, Taipei, Taiwan, R.O.C., Avril 2009b. (Cité pages 8 et 61.)
- S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, et M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220 :671–680, 1983. (Cité page 1.)
- R. F. M. Kleissen, J. H. Buurke, J. Harlaar, et G. Zilvold. Electromyography in the biomechanical analysis of human movement and its clinical application. *Gait Posture*, 8(2) :143 – 158, 1998. (Cité page 4.)
- J. J. Kormylo et J. M. Mendel. Maximum-likelihood seismic deconvolution. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, GE-21(1) :72–82, Janvier 1983. (Cité pages 35, 36, 37 et 45.)
- C. Labat et J. Idier. Sparse blind deconvolution accounting for time-shift ambiguity. Dans *Proc. IEEE ICASSP*, volume III, pages 616–619, Toulouse, mai 2006. (Cité pages ix, 35, 37, 39, 40, 42, 45 et 78.)
- R. S. Lefever et C. J. De Luca. A Procedure for Decomposing the Myoelectric Signal Into its Constituent Action Potentials : Part i. technique, theory, and implementation. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, BME-29(3) :149–157, Mar 1982. (Cité pages 4, 8, 11 et 12.)
- M. S. Lewicki. Bayesian modeling and classification of neural signals. *Neural Computation*, 6 :1005–1030, 1994. (Cité pages 5, 6 et 18.)
- M. S. Lewicki. A review of methods for spike sorting : the detection and classification of neural action potentials. *Network : Computation in Neural Systems*, 9(4) :R53–R78, 1998. (Cité pages 1, 4, 5, 15, 18 et 33.)
- J. S. Liu. *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing*. Springer Series in Statistics. Springer Verlag, New York, NY, USA, 2001. ISBN 0-387-95230-6. (Cité pages 37, 42, 48, 51 et 58.)
- J. S. Liu et C. Sabatti. Generalized gibbs sampler and multigrid monte carlo for bayesian computation. *Biometrika*, 87 :353–369, 1999. (Cité page 42.)
- J. S. Liu, W. H. Wong, et A. Kong. Covariance Structure of the Gibbs Sampler with Applications to the Comparisons of Estimators and Augmentation Schemes. *Biometrika*, 81 :27–40, 1994. (Cité page 51.)
- J. S. Liu et Y. N. Wu. Parameter expansion for data augmentation. *Journal of the American Statistical Association*, 94 :1264–1274, 1999. (Cité pages ix, 42 et 43.)

- S. Lloyd. Least squares quantization in pcm. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 28(2) :129–137, 1982. (Cité page 16.)
- C. J. De Luca, A. Adam, R. Wotiz, L. D. Gilmore, et S. H. Nawab. Decomposition of Surface EMG Signals. *J. Neurophysiol.*, 96 :1646–1657, May 2006. ISSN 0022-3077. (Cité page 27.)
- C. J. De Luca, R. S. LeFever, M. P. McCue, et A. P. Xenakis. Control scheme governing concurrently active human motor units during voluntary contractions. *J. Physiol.*, 329 :129–142, Aug 1982. (Cité pages 1 et 9.)
- K. C. McGill. Optimal resolution of superimposed action potentials. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, 49(7) :640–650, Jul 2002. (Cité pages 4, 5, 6, 7, 11, 26, 33, 71 et 77.)
- K. C. McGill, K. L. Cummins, et L. J. Dorfman. Automatic decomposition of the clinical electromyogram. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, BME-32(7) :470–477, Jul 1985. (Cité pages 7, 8, 11, 12, 14, 16 et 77.)
- K. C. McGill et L. J. Dorfman. High-resolution alignment of sampled waveforms. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, BME-31(6) :462–468, Jun 1984. (Cité pages 7, 14, 16, 17 et 78.)
- K. C. McGill, Z. C. Lateva, et M. E. Johanson. Validation of a computer-aided EMG decomposition method. *Engineering in Medicine and Biology Society, 2004. IEMBS '04. 26th Annual International Conference of the IEEE*, 2 :4744–4747, Sep 2004. (Cité page 27.)
- K. C. McGill, Z. C. Lateva, et H. R. Marateb. EMGLAB : An interactive EMG decomposition program. *J. Neurosci. Methods*, 149(2) :121–133, Dec 2005. (Cité pages 4, 6, 11, 26, 33, 71 et 77.)
- C. T. Moritz, B. K. Barry, M. A. Pascoe, et R. M. Enoka. Discharge rate variability influences the variation in force fluctuations across the working range of a hand muscle. *J. Neurophysiol.*, 93(5) :2449–2459, May 2005. ISSN 0022-3077. (Cité page 4.)
- S. Moussaoui. *Séparation de sources non-négatives. Application au traitement des signaux de spectroscopie*. Thèse doctorale, Université Henri Poincaré, Nancy 1, 2005. (Cité page 76.)
- R. M. Neal. Markov chain sampling methods for Dirichlet process mixture models. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 9 :249–265, 2000. (Cité pages 85 et 86.)
- D. Nguyen, L. Frank, et E. Brown. An application of reversible-jump markov chain monte carlo to spike classification of multi-unit extracellular recordings. *Network*, 14 :61–82, 2003. (Cité page 16.)
- T. Park et D. A. Van Dyk. Partially Collapsed Gibbs Samplers : Illustrations and Applications. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, (2) :283–305, 2009. (Cité page 51.)
- M. M. Rao. *Measure Theory and Integration*. New York : Wiley, 1987. (Cité page 89.)
- C. Rasmussen. The infinite gaussian mixture model. *Adv. Neur. Inf. Proc. Sys. 12, MIT Press*, 12 :554–560, 2000. (Cité page 16.)
- C. Robert. *Méthodes de Monte-Carlo par chaînes de Markov*. Economica, Paris, France, 1996. (Cité page 82.)

- C. P. Robert et G. Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer Texts in Statistics. Springer Verlag, New York, NY, USA, deuxième édition, 2004. (Cité page 37.)
- W. M. Roberts et D. K. Hartline. Separation of multi-unit nerve impulse trains by a multi-channel linear filter algorithm. *Brain Research*, 94(1) :141 – 149, 1975. (Cité page 5.)
- E. M. Schmidt. Computer separation of multi-unit neuroelectric data : a review. *J. Neurosci. Meth.*, 12 :95–111, May 1984. (Cité pages 1 et 5.)
- M. Seeger. Low Rank Updates for the Cholesky Decomposition. Rapport technique, Department of EECS, University of California at Berkeley, 485 Soda Hall, Berkeley CA, 2008. (Cité page 90.)
- D. Stashuk et H. De Bruin. Automatic decomposition of selective needle-detected myoelectric signals. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, 35(1) :1–10, Jan 1988. (Cité page 16.)
- L. Tierney. Markov Chains for Exploring Posterior Distributions. *Ann. Statist.*, 22(4) : 1701–1728, 1994. (Cité page 66.)
- T. Veit, J. Idier, et S. Moussaoui. Rééchantillonnage de l'échelle dans les algorithmes MCMC pour les problèmes inverses bilinéaires. à paraître, *Traitement du Signal*, 2009. (Cité pages 36, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 60 et 78.)
- B. C. Wheeler et W. J. Heetderks. A Comparison of Techniques for Classification of Multiple Neural Signals. *IEEE Trans. Biomed Eng.*, BME-29(12) :752–759, Dec 1982. (Cité pages 5 et 16.)
- F. Wood et M. J. Black. A nonparametric bayesian alternative to spike sorting. *J. Neurosci. Methods*, 173(1) :1 – 12, 2008. (Cité pages 11, 16, 17, 77, 84, 86 et 87.)



# NOTATIONS ET ABRÉVIATIONS

Afin d'alléger les notations, nous ne distinguerons pas dans cette thèse les variables aléatoires de leur réalisation.

## NOTATIONS

$\sim$	Distribué suivant
$*$	Produit de convolution
$\gg$	très supérieur à
$\ll$	très inférieur à
$\propto$	Proportionnel à
$\hat{\cdot}$	Estimation
$\cdot^t$	Transposée
$1_{\mathcal{C}}(\cdot)$	Fonction indicatrice, vaut un sur l'espace $\mathcal{C}$ et zéro ailleurs
$\delta(\cdot)$	fonction dirac discrète ou continue
$P(\cdot)$	Densité de probabilité
$x_n$	n-ème élément du vecteur $\mathbf{x}$
$\mathbf{x}_{-n}$	Vecteur $\mathbf{x}$ sans l'élément $x_n$
$\mathbf{I}_m$	Matrice identité de dimension $m \times m$
$\mathbf{0}_m$	Matrice nulle de dimension $m \times m$
$\{\cdot\}_a$	L'ensemble de $\cdot$ paramétré par $a$

## ABRÉVIATIONS

CRP	processus de restaurant chinois ( <i>Chinese Restaurant Process</i> )
DAG	graphe acyclique orienté (directed acyclic graph)
EMG	signal électromyographique
FIFO	<i>First In First Out</i>
i.i.d.	indépendants et identiquement distribués
IGMM	modèle de mélange de gaussiennes infinis
ISI	<i>interspike intervals</i>
MCMC	Monte Carlo par chaînes de Markov ( <i>Monte Carlo Markov Chain</i> )
MAP	maximum a posteriori
MMAP	Maximum a posteriori marginal
MMSE	estimateur qui minimise l'erreur quadratique moyenne ( <i>minimum mean square error</i> )
MUAP	<i>Motor Unit Action Potential</i>
MVC	<i>Maximum Voluntary Contraction</i>
PCA	Analyse des composantes principales
PCG	Partially Collapsed Gibbs Sampler



$p.s.$	presque sûrement
RI	réponse impulsionnelle
RJCMC	MCMC par saut réversible ( <i>Reversible Jump MCMC</i> )
RSB	rapport signal sur bruit
UM	unité motrice

## DISTRIBUTIONS DE PROBABILITÉ USUELLES

$\mathcal{U}_{[0,1]}$	loi uniformément distribuée dans l'intervalle $[0, 1]$
$\text{Be}(a, b)$	loi Beta de paramètres $a$ et $b$
$\mathcal{N}(\boldsymbol{x}, \Sigma)$	loi normale de vecteur moyenne $\boldsymbol{x}$ et de matrice de covariance $\Sigma$
$\text{IG}(a, b)$	loi Gamma inverse de paramètres $a$ et $b$
$\text{GIG}(\lambda, a, b)$	loi inverse Gaussienne généralisée de paramètres $\lambda, a$ et $b$



**Titre** Déconvolution impulsionnelle multi-source. Application aux signaux électromyographiques

**Résumé** Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre l'IRCCyN (UMR 6597) et le laboratoire SMI (Sensory-Motor Interaction, Université d'Aalborg, Danemark). L'objectif est de développer des méthodes de décomposition de signaux électromyographiques (EMG). Les applications sont multiples, *e.g.*, l'aide au diagnostic. De tels signaux peuvent être modélisés comme une somme bruitée de  $I$  composantes, chacune étant la réponse d'un système linéaire excité par un train d'impulsions. Les paramètres du modèle sont estimés par une technique bayésienne. Les lois *a priori* des paramètres continus sont choisies de sorte que les lois marginales *a posteriori* sont analytiques. Dans un premier temps est proposée une méthode déterministe par maximisation de la distribution *a posteriori*. La difficulté majeure consiste en l'estimation des trains d'impulsions. Ceux-ci (paramètres discrets) constituent un espace combinatoire; la recherche du maximum est traitée par l'algorithme Tabou. Dans un deuxième temps, on souhaite éviter le réglage des paramètres associés à l'algorithme Tabou : l'approche bayésienne couplée aux techniques MCMC fournit un cadre d'étude très efficace. Un algorithme de Gibbs hybride est proposé, dans lequel une étape Metropolis-Hastings sur les trains d'impulsions permet d'éviter un calcul de complexité exponentielle, tout en garantissant l'irréductibilité de la chaîne de Markov. Les techniques issues de l'algorithme MCMC pour la déconvolution d'un processus Bernoulli-gaussien sont appliquées. En particulier, le rééchantillonnage d'échelle et la marginalisation des amplitudes sont adaptés au modèle physique en tenant compte de la variabilité d'amplitudes des impulsions. Les algorithmes sont validés sur des signaux EMG simulés et expérimentaux.

**Mots-clés** Problèmes inverses, séparation des sources, modèle bayésienne, MCMC

**Title** Multi-source impulsive deconvolution. Application to electromyographic signals

**Abstract** This thesis is part of a collaboration between the IRCCyN (UMR 6597) and the SMI centre (Sensory-Motor Interaction, Aalborg University, Denmark) aiming at developing decomposition methods for electromyographic signals (EMG). The applications are manifold, *e.g.*, aid to diagnostics.

Such signals can be modeled as a noisy sum of  $I$  components, each as the response of a linear system excited by a pulse train. The model parameters are estimated using a Bayesian technique. Prior laws on the continuous parameters are chosen so that the marginal *a posteriori* distributions are analytic. Firstly, we proposed a deterministic method by maximization of the posterior distribution. The major difficulty is in estimating the pulse trains. These discrete parameters constitute a combinatorial space, of which the search for the maximum is treated by the Tabu algorithm. Secondly, to avoid setting parameters associated with the Tabu algorithm, we adopted the efficient framework of a Bayesian approach coupled with MCMC techniques. A hybrid Gibbs algorithm is proposed in which a Metropolis-Hastings step samples the impulse trains, thus avoiding a computation load of exponential complexity, while ensuring the irreducibility of the Markov chain. Techniques from the MCMC algorithm for the deconvolution of Bernoulli-Gaussian processes are applied. In particular, the re-sampling of scale and the marginalization of the amplitudes are adapted to the physical model that takes into account the variability of the pulses' amplitudes.

The algorithms are validated on simulated EMG signals and the experimental signals.

**Keywords** Inverse problem, blind source separation, Bayesian modeling, MCMC